

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA
FACULTAD DE INGENIERÍA



SIMULACIÓN DE LA INTERACCIÓN DE UN VOLADIZO CON
UNA SUPERFICIE HETEROGÉNEA EN UN MICROSCOPIO DE
FUERZA ATÓMICA

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE

MAESTRO EN CIENCIAS

PRESENTA

RUBÉN ALANIZ PLATA

DIRECTOR DE TESIS: DR. JESÚS RIGOBERTO HERRERA GARCÍA

CODIRECTOR DE TESIS: DR. LUIS ARTURO MARTINEZ ALVARADO

Resumen

El Microscopio de Fuerza Atómica (AFM, por sus siglas en inglés) es ampliamente utilizado en la caracterización de superficies alcanzando resolución atómica. Es un instrumento versátil cuyo objetivo es identificar la topografía y las fases de la superficie en una muestra. Existen modelos que predicen con buena exactitud la interacción entre el voladizo del microscopio y la superficie, que sumados al procesamiento de señales del sistema permiten el diseño de microscopios virtuales. Para determinar parámetros óptimos y algoritmos de medición que permitan mayor rendimiento y precisión en las técnicas de microscopía de barrido, se simula la interacción de una superficie heterogénea con el voladizo. Se logra para ello, a través de una interfaz gráfica mostrar al usuario las señales, superficies y datos generados en el proceso de simulación de la interacción. El análisis se realiza a lazo abierto y simplificando considerablemente el sistema, sin embargo es posible mejorar la simulación incluyendo más elementos en la función de transferencia y señales de control.

Dedicatoria

A mis padres y hermanas, mi soporte.

A Alejandra, mi felicidad.

A mis sobrinos, mi inspiración diaria.

Agradecimientos

Siempre le estaré agradecido a mi director de tesis, el Dr. Rigoberto Herrera, por la invaluable amistad, confianza y conocimientos brindados durante mis estudios de licenciatura y maestría.

A mi codirector de tesis, el Dr. Luis Arturo Martínez, por aportar a mi proyecto con sus consejos y experiencia.

A la Dra. Noemí Lizárraga y la Dra. Marlene Zamora por estar siempre presente y demostrarme su sincero apoyo.

Le agradezco al Dr. Iván Olaf por sus conocimientos que fueron un gran aporte a mi trabajo.

A los profesores, Dr. Guillermo Galaviz y la M. C. Eva Herrera. Muchas gracias por todo su apoyo y confianza.

A mis profesoras de maestría: Dra. Margarita Gil y la M. C. Marlenne Angulo. Gracias por su cariño y conocimientos.

A mis compañeros de posgrado, Irma y Alexis, gracias por su amistad y por estar a mi lado durante nuestros estudios.

Agradezco a la Facultad de Ingeniería, a su personal administrativo y docentes por hacer de esta universidad una segunda casa para todos los estudiantes y académicos.

A CONACYT y al pueblo mexicano le agradezco el apoyo brindado a través del apoyo económico, indispensable para alcanzar mis estudios de maestría.

Índice general

1. Introducción	1
1.1. Antecedentes	4
1.1.1. Historia	4
1.1.2. Modelado del voladizo	6
1.1.3. Resolución	6
1.1.4. Muestras heterogéneas	7
1.2. Planteamiento del problema	7
1.3. Hipótesis	8
1.4. Justificación	9
1.5. Objetivo general	9
1.6. Objetivos específicos	10
2. Marco teórico	12
2.1. Microscopio de fuerza atómica: componentes	12
2.1.1. Voladizo	13
2.1.2. Fotodetector	14
2.1.3. Sistema de barrido	14
2.2. Modos de operación	15
2.2.1. Contacto	15
2.2.2. No contacto	15
2.2.3. Contacto intermitente	17
2.3. Artefactos	17
2.4. Simulación	18

2.5. Control	19
3. Metodología	20
3.1. Función de transferencia del voladizo	20
3.2. Modelado de la superficie de la muestra	21
3.3. Cálculo de fuerzas de interacción	23
3.3.1. Constante de Hamaker	25
3.4. Análisis de la señal de entrada	26
3.4.1. Convolución	27
3.5. Señal de salida	28
3.5.1. Representación en dos dimensiones	30
4. Resultados	32
4.1. Algoritmo de generación de la superficie de la muestra	32
4.1.1. Superficie de valores aleatorios	32
4.1.2. Superficie con escalones de alturas aleatorias	33
4.1.3. Superficie con escalones de alturas aleatorias y subdivisiones es- calonadas	35
4.1.4. Superficie externa	37
4.2. Algoritmo de generación de señal de entrada	37
4.2.1. Escalonado de la señal de entrada	39
4.3. Algoritmo de análisis	40
4.4. Procesamiento de la señal de salida	41
4.5. Reconstrucción de la muestra	42
4.6. Deflexión a fuerza	42
4.7. Fuerza a altura	43
4.8. Interpretación de resultados	44
4.8.1. Resolución	44
4.8.2. Fases en muestras heterogéneas	46
4.9. Datos comparativos	49
4.10. Simulador	52

4.10.1. Interfaz	52
5. Conclusiones	58
Bibliografía	60

Índice de figuras

1.1. Dimensiones generales del cuerpo de un voladizo	6
2.1. Componentes de un microscopio de fuerza atómica.	12
2.2. Fotodetector de cuatro cuadrantes con láser incidiendo en el cuadrante B.	14
2.3. Giro del cuerpo del voladizo debido a las fuerzas laterales.	15
2.4. Zona de atracción en la curva del potencial de Lennard-Jones.	16
2.5. Artefacto en el barrido de muestras heterogéneas.	16
2.6. Regiones de los diferentes modos de operación de acuerdo a la distancia entre el voladizo y la muestra.	17
2.7. Artefacto debido a la convolución de la muestra y de la punta del voladizo.	18
3.1. Matriz de puntos aleatorios en el espacio.	22
3.2. Superficie de valores aleatorios.	22
3.3. Superficie escalonada.	23
3.4. Voladizo de punta piramidal en interacción con un plano.	24
3.5. Dimensionamiento de la punta del voladizo.	24
3.6. Señal de entrada.	25
3.7. Respuesta al impulso unitario de la función de transferencia.	27
3.8. Diagrama de bloques básico de un sistema lineal para el análisis de señales.	28
3.9. Señal de salida procesada.	29
3.10. Perfiles de la señal de salida.	29
3.11. Comparación de la superficie original y la reconstruida.	30
3.12. Señal de salida desde la vista superior.	31

4.1. Diagrama de flujo del algoritmo para la generación de la gráfica de valores aleatorios.	33
4.2. Diagrama de flujo de algoritmo para generar muestra escalonada. . . .	34
4.3. Diagrama de flujo de algoritmo para generar muestra con subescalones.	36
4.4. Muestra con subescalones.	37
4.5. Distribución de áreas correspondientes a cada punto de la matriz de la muestra.	38
4.6. Interacción por secciones del área de contacto.	39
4.7. Escalonado de la señal de entrada.	40
4.8. Señal de salida sin procesar	41
4.9. Comparación de la señal de salida sin procesar y la procesada.	42
4.10. Imagen de fuerza formada a partir de la deflexión del voladizo.	43
4.11. Superficie reconstruida basada en la señal de fuerza.	44
4.12. Cambio de la resolución variando la velocidad	45
4.13. Cambio de la resolución variando la cantidad de pasos por linea	46
4.14. Dependencia de la composición química en el cálculo fuerzas de interacción punta-muestra.	47
4.15. Señal de salida en comparación con la superficie de una muestra heterogénea.	48
4.16. Reconstrucción de una muestra heterogénea.	48
4.17. Representación de la diferencia en cantidad de datos entre dos matrices a comparar.	49
4.18. Matrices con datos interpolados.	49
4.19. Tendencia de la correlación contra la cantidad de pasos por linea. . . .	50
4.20. Tendencia de la correlación contra la velocidad de barrido.	51
4.21. Vista general de la pestaña «Parámetros» del simulador.	52
4.22. Sección del modelado de la geometría de la muestra.	53
4.23. Sección de la selección del tipo de superficie a generar.	53
4.24. Sección para la importación de superficies externas.	53
4.25. Sección para el modelado del voladizo.	54

4.26. Sección de asignación de materiales.	54
4.27. Sección de introducción de parámetros de operación.	55
4.28. Sección de ejecución de la simulación y centro de mensajes.	55
4.29. Vista general de la pestaña «Resultados» del simulador	56
4.30. Vista general de la pestaña «Reporte» del simulador	57

Índice de tablas

3.1. Valores de la constante de Hamaker para diferentes combinaciones de materiales en el voladizo y la muestra en distintos medios	26
4.1. Relación de la cantidad de pasos por línea con la resolución de la superficie reconstruida.	50
4.2. Relación de la velocidad de barrido con la resolución de la superficie reconstruida.	51

1. Introducción

La caracterización de materiales permite obtener las propiedades de un material para diseñar dispositivos y elementos con la garantía de que va a cumplir su función. La microscopía de fuerza atómica es una técnica que permite caracterizar la topografía de materiales con resolución atómica. Su funcionamiento se basa en la interacción de una punta muy fina con la muestra donde dicha punta se barre en toda la superficie, mostrando de forma gráfica el mapeo realizado con fines de percepción a nivel atómico y micrométrico [1]. Con la técnica, es posible analizar materiales blandos, duros y biomateriales (virus, células, biomoléculas). La precisión de este método puede variar desde los $100\mu m$ hasta menos de $1\mu m$ con el uso de una punta que puede tener un diámetro de hasta menos de 100 ángstroms y una viga voladiza de entre 100 y $200\mu m$ [2].

La viga voladiza (o cantiléver) pertenece a la tecnología de los Sistemas Microelectromecánicos (MEMS por sus siglas en inglés), que requiere procesos empleados para crear pequeños dispositivos integrados o sistemas que combinan componentes eléctricos y mecánicos. Son fabricados a través de técnicas de lote de los circuitos integrados y sus dimensiones van desde unos cuantos micrómetros hasta milímetros. Estos dispositivos (o sistemas) tienen la habilidad de detectar, controlar y actuar en una escala micro, y generar efectos en una escala macro [3].

El modelo simplificado de la función de transferencia de un voladizo es el masa-resorte-amortiguador, con el que se puede obtener una respuesta a lazo abierto de su comportamiento durante el análisis de microscopía de fuerza atómica. En el modelo se debe considerar la masa efectiva (m), la constante del resorte (k) y el amortiguador representado por el coeficiente de amortiguamiento viscoso (b) del voladizo.

La masa efectiva del voladizo es la que permite predecir correctamente el compor-

tamiento del sistema, siendo directamente proporcional a su rigidez, como se muestra en la ecuación 1.1

$$m = \frac{k}{w^2} \quad (1.1)$$

donde w es la frecuencia de resonancia.

El coeficiente de amortiguamiento viscoso está relacionado con el fluido en el que se encuentra inmerso el voladizo (vacío, aire, agua, etc.) y la composición de los materiales del voladizo y la muestra. Para su cálculo, se puede utilizar como auxiliar a la constante de Hamaker.

Ante cualquier impulso externo existirá un amortiguamiento que hace que eventualmente se detenga el movimiento del voladizo, donde el tiempo de asentamiento es el requerido para estabilizarse. Para obtener el tipo de amortiguamiento es necesario calcular el coeficiente de amortiguamiento (ξ), a través del coeficiente de amortiguamiento viscoso y la masa efectiva

$$\xi = \frac{b}{2wm} \quad (1.2)$$

Si $\xi < 1$ se presenta un comportamiento subamortiguado, para $\xi = 1$ es críticamente amortiguado y si $\xi > 1$ es sobreamortiguado.

Las principales variables que afectan la resolución del microscopio son la velocidad de barrido, la cantidad de pasos por línea a analizar, el tiempo de asentamiento del voladizo, sensibilidad del fotodetector, gradientes de composición química, entre otros. Siendo la velocidad de barrido y la cantidad de pasos regulables a través de los parámetros de operación de la unidad de barrido, considerando que a menor velocidad de barrido y mayor cantidad de pasos se obtiene una mayor resolución. El tiempo de asentamiento se puede calcular a través de su relación con la masa, la constante del resorte y el coeficiente de amortiguamiento viscoso del voladizo.

Se puede considerar la hipótesis que si se desea obtener una imagen de muy alta resolución basta con disminuir la velocidad de barrido lo más cercana a cero posible. Sin embargo, los actuadores piezoeléctricos encargados de mover la plataforma sobre los tres ejes tienen un límite de desplazamiento mínimo que limita la velocidad mínima de

barrido y cantidad de pasos por línea, influyendo en el límite de resolución máxima. Es posible alcanzar velocidades de barrido de hasta $1 \mu m/s$ en vacío y $2 \mu m/s$ en agua [4] y desplazamientos mínimos de hasta $1 nm$ [5].

Además, debido a límites intrínsecos no es posible seguir la geometría de la superficie de manera precisa, generando un error llamado artefactos. Existen distintos tipos de artefactos, el principal es el generado por la punta del voladizo que provoca que éste no pueda entrar a determinados rincones de la geometría de la muestra. Es decir, debido a que la punta tiene una escala semiesférica no es posible que logre barrer rincones a donde no puede acceder, además de los causados debido a ruido térmico, campos electromagnéticos, entre otros [6].

También se presentan artefactos debido a la composición química de la muestra, esto es, si la muestra es heterogénea, el voladizo interactúa con regiones de distintos materiales, y ya que las fuerzas interacción punta-muestra que ayudan al microscopio a formar la imagen de salida están directamente relacionadas con la composición química de ambas partes, se puede visualizar una topografía en la que ciertas regiones de la señal de salida se encuentran a diferentes alturas comparadas con otras a pesar de que en la muestra no exista esa diferencia.

Estos artefactos pueden ser simulados para identificar como impactan en los datos de salida y corregirlos con procesamiento.

Idealmente, el modelo de la función de transferencia del masa-resorte-amortiguador permite obtener cualquier interacción entre la punta y la superficie, pero en un análisis real existe un límite de detección en el microscopio dependiente de la sensibilidad del fotodetector que sensa el movimiento del voladizo. En la simulación, es posible notar cualquier cambio debido a que pueden no considerarse los límites de los equipos y márgenes de error.

Para acercar el modelo al comportamiento real del sistema se puede incluir, en la medida de lo posible, la etapa de instrumentación y control en la función de transferencia con los coeficientes de sensibilidad de los sensores y los actuadores.

1.1. Antecedentes

1.1.1. Historia

En 1989, la Microscopía de Fuerza Atómica (AFM por sus siglas en inglés) fue inventada por Gerd Binnig para corregir la limitación de su predecesor, el Microscopio de Barrido por Tunelaje (STM por sus siglas en inglés). El STM puede únicamente caracterizar materiales conductores [7], aplicando un diferencial de potencial entre una punta y la muestra a caracterizar y midiendo la corriente de conducción mediante el efecto tunel que se da cuando los electrones pasan de un lado a otro a través del vacío entre ambas partes [8]. El AFM abrió las puertas a la caracterización de superficies de otros materiales, como polímeros y muestras biológicas no conductoras. En algunos casos, la resolución de STM es mejor que la del AFM por la dependencia exponencial de la corriente de tunelaje en la distancia. La dependencia distancia-fuerza en el AFM es mucho más compleja cuando las características como la forma de la punta y la fuerza de contacto son consideradas, ya que limitan que el barrido no se pueda dar en todos los espacios de la superficie. El AFM tiene mejor desempeño en términos de versatilidad y facilidad. En comparación con otras formas de microscopía el AFM es mejor o comparable debido a que se pueden obtener imágenes de escala incluso atómica [2] y en diversidad de muestras con diferente conductividad.

Paralelamente al desarrollo del primer Microscopio de Fuerza Atómica, fue creado el primer voladizo para este fin (en 1986), siendo éste únicamente capaz de hacer un análisis por el modo de operación de contacto. Por lo cual, solamente se podían analizar materiales que no pudieran ser dañados por la punta. En el caso de los materiales blandos la punta los llegaba a penetrar y no se efectuaba correctamente el barrido o se terminaba destruyendo la muestra [9, 10].

Así que, en 1987 se creó el primer voladizo que pudiera funcionar por el medio de operación de no contacto [11]. Esto con el fin de caracterizar muestras biológicas que pudieran ser dañadas en el modo por contacto por la punta durante el proceso [12]. La rigidez de los voladizos utilizados en el modo de operación de no contacto suele ser

mayor a los usados en modo de contacto para que estos sufran poca deflexión y no toquen a la muestra por accidente [13]. Considerando un alto valor de k y un bajo valor de masa, la frecuencia de resonancia de los voladizos suele ser mayor en este modo de operación.

En 1993 se introdujo el modo de contacto intermitente por [11], en el cual el voladizo oscila a su frecuencia natural, pero contrario al modo de no contacto, la punta del voladizo hace contacto suavemente con la superficie durante el barrido, reduciendo de buena manera el daño por fuerzas laterales que se dan en el modo de operación de contacto. Sin embargo, el voladizo se deflexiona de manera vertical y horizontal, provocando ruido en las mediciones del fotodetector debido a que el láser se refleja en ambos sentidos y no solo de manera vertical como los modos de no contacto y contacto intermitente [14].

Los voladizos más pequeños fueron desarrollados en 1996 [11], permitiendo una mayor resolución y menor tiempo de barrido. Para lograrlo, se considera que la velocidad de barrido esta dada por

$$v << \frac{\lambda d}{2m} \quad (1.3)$$

Donde λ es la rugosidad de la superficie. Por lo que a menor masa, mayor velocidad de barrido logra el voladizo. Estos voladizos son utilizados para caracterizar muestras biológicas, ya que la microscopía de fuerza atómica de alta velocidad permite visualizar los cambios con respecto al tiempo que suelen tener estas muestras [15].

Para ser sensible a las pequeñas fuerzas, la constante del resorte del voladizo (k) tiene que ser seleccionada lo más pequeña posible (de 0.01 a 100N/m) y para minimizar la influencia de ondas acústicas y las vibraciones del entorno del elemento se mantiene la alta a la frecuencia de resonancia (aproximadamente de 10 a 100kHz) [9]. Partiendo de la ecuación 1.1 se obtiene que la frecuencia de resonancia es proporcional a la ecuación 1.4, por lo que la masa y las dimensiones del voladizo deben minimizarse.

$$w = \sqrt{k/m} \quad (1.4)$$

1.1.2. Modelado del voladizo

El voladizo es una viga de sección rectangular con una punta en el extremo libre. Según la aplicación, se fabrican de materiales como silicio, óxido de silicio, plata, oro [16, 17] y se recubren con el fin de mejorar la reflexión del haz de luz que se le incide [18], para mejorar su desempeño durante el barrido [19], entre otros. La geometría del voladizo es como la que se muestra en la figura 1.1



Figura 1.1: Dimensiones generales del cuerpo de un voladizo

Actualmente hay alternativas a la obtención de datos empleando voladizos piezoeléctricos encargados de enviar una señal de voltaje precisa dependiente de la deflexión que sufra durante el barrido [20], diversificando las opciones para la caracterización con la microscopía de fuerza atómica.

Se ha simulado su comportamiento con el fin de calcular propiedades mecánicas (como el módulo de Young y la adhesión punta-superficie) [21,22], implementar sistemas de control [23,24], mejorar su diseño en aplicaciones específicas [25,26] y con enfoque didáctico para la visualización del comportamiento durante el barrido y de artefactos [27].

La función de transferencia utilizada para estudiar al voladizo comúnmente utilizada es la del sistema masa-resorte-amortiguador [28, 29], pero también se suelen utilizar otras funciones que se ajustan condiciones de operación especiales y que suelen ser más complejas [30,31]. En ambos casos resulta útil para simular su comportamiento y buscar áreas de oportunidad en la mejora de la técnica.

1.1.3. Resolución

Las aportaciones a la resolución del microscopio van principalmente dirigidas a la mejora de sus componentes. En el caso del voladizo se busca que la punta sea más

fin a barrer la superficie de la muestra con mayor precisión [32, 33], la unidad de barrido se ve beneficiada con la mejora de sistemas de posicionamiento y de control más precisos [34–37] y los componentes piezoeléctricos han logrado desplazamientos a escalas subatómicas [38, 39].

En cuanto al análisis de datos (una vez que ya se caracterizó la muestra), se han desarrollado paquetes de software como Gwyddion (gratuito, de código abierto) y SPIP (de pago) que cuentan con herramientas para la visualización de resultados, mejora de las imágenes de salida, corrección de errores, etc.

1.1.4. Muestras heterogéneas

Además de la obtención de la topografía de la superficie, con la microscopía de fuerza atómica se observan los cambios de composición química de la superficie de la muestra, generando una imagen a través del modo de detección de fases [40]. Esto se logra comparando las fuerzas de interacción punta-muestra de los elementos que componen a ambas partes, considerando que por cada par de elementos cambia la magnitud de estas fuerzas [41] y, a partir de esto, se va formando una imagen de salida donde se visualizan regiones compuestas por distintos materiales.

1.2. Planteamiento del problema

Una correcta caracterización superficial con la técnica de microscopía de fuerza atómica requiere de varias horas de ensayos de prueba y error para acercarse a parámetros que permitan obtener datos con resolución óptima, particularmente en nuevos usuarios de la técnica. También se debe seleccionar el voladizo que se va a utilizar para barrer la superficie y cómo reacciona a esta selección de parámetros.

Es indispensable identificar cuales parámetros serían los adecuados para operar al microscopio de la manera más óptima, ahorrando tiempo y esfuerzo para obtener imágenes de alta resolución, considerando aspectos como propiedades intrínsecas del voladizo y composición química de la muestra (en muestras heterogéneas) en la que la caracte-

rización suele complicarse, ya que, durante el barrido, en cada cambio de material se generan artefactos que es importante tomarlos en cuenta para una correcta interpretación de resultados.

Si se cuenta con la experiencia necesaria en el campo de la microscopía, se logra tener una idea de los parámetros de operación adecuados basado en conocimiento empírico. Sin embargo, para nuevos usuarios de la técnica suele resultar más complicado ya que existen distintas variables (velocidad de barrido, modos de operación, medio, composición y dimensiones del voladizo, entre otros) que si no se tiene el conocimiento de la manera en que afectan a la caracterización, la resolución de la imagen de salida y la fiabilidad de los datos obtenidos se ven afectados.

Introducirse a la técnica involucra investigar a fondo los principios fundamentales de la microscopía de fuerza atómica, estudiar el funcionamiento de los equipos y lograr el acceso a uno de ellos. Por lo que, el desarrollo de simuladores y herramientas virtuales que permitan ser manipuladas tanto con fines didácticos como para la experimentación, resulta idóneo para hacer más accesible a la técnica para entusiastas, así como una útil herramientas para investigadores.

1.3. Hipótesis

Caracterizar una muestra a través de la microscopía de fuerza atómica permite formar una imagen de su topografía con una precisión que pocas técnicas llegan a alcanzar. Sin embargo, resulta costoso contar con el equipo, además de que es necesario adquirir los conocimientos fundamentales de la microscopía de fuerza atómica para su correcta operación y análisis de resultados.

Se tiene la hipótesis de que se puede desarrollar un simulador que permita introducir la mayor cantidad de variables necesarias para la caracterización a través de la microscopía de fuerza atómica, analizando la correlación de la resolución de la imagen

de salida, los parámetros de operación del microscopio de fuerza atómica, la instrumentación virtual y los fenómenos de interacción entre el voladizo y la muestra a analizar, sirviendo como herramienta previa a la caracterización para corroborar la idoneidad de estos parámetros y como auxiliar en el aprendizaje para entusiastas del área.

1.4. Justificación

Se requieren identificar los parámetros de operación idóneos para la caracterización en una fracción del tiempo usados en prueba y error durante la experimentación, ya que puede llegar a tomar horas (dependiendo de la resolución de salida esperada, el tipo de muestra a analizar y el modo de operación). Es posible disminuir costos asociados a los gastos de operación e insumos (voladizos y muestras) a través de la simulación de la microscopía de fuerza atómica, evaluando el desempeño de estos materiales sin provocar desgaste y/o desperdicio. Desarrollar un simulador presenta una gran ventaja para la introducción a la microscopía de fuerza atómica, ya que le da retroalimentación al usuario antes de adentrarse a la técnica [42] bajo un ambiente didáctico. Un simulador que sea de código abierto deja la posibilidad de que los especialistas aporten su mejora y, por lo tanto, a la de la técnica al facilitar la caracterización. Además, considerar en el desarrollo aspectos como los artefactos debidos a las fases en muestras heterogéneas y los límites intrínsecos de la instrumentación aportan a la obtención de resultados que contemplen los límites de resolución del equipo y del voladizo en caracterizaciones específicas.

1.5. Objetivo general

Modelar y simular el comportamiento de la interacción de un voladizo con una muestra heterogénea en un análisis de microscopía a través de un programa desarrollado en MATLAB para obtener parámetros de operación idóneos para aplicaciones específicas en la caracterización de materiales con el microscopio de fuerza atómica, e identificar los límites intrínsecos de la resolución y su correlación con las tecnologías que integran

el microscopio.

1.6. Objetivos específicos

- Identificar la función de transferencia basada en el sistema masa-resorte-amortiguador para el cálculo de la interacción del voladizo para cualquier superficie e introducir el modelo de Lennard-Jones para determinar la señal de entrada y así modelar el voladizo a través de la consideración de su geometría, composición química y sus propiedades intrínsecas (masa, rigidez y amortiguamiento). Permitiendo al usuario formar al voladizo bajo diseño propio o basado en diseños existentes en el mercado.
- Desarrollar algoritmos para formar diferentes tipos de superficies que darán lugar a las señales de entrada, con características en común (largo, ancho, altura máxima y cantidad de datos en una matriz que la formarán) las cuales puedan ser definidas por el usuario y al mismo tiempo contengan desarrollo de relieves con valores aleatorios y no aleatorios dentro de un rango preestablecido. Además, que permita manejar superficies que fueron generadas de manera externa y procesarlas de igual manera que las generadas por el simulador, abriendo la posibilidad de utilizar algoritmos para la generación de superficies que se ajusten a las necesidades del usuario.
- Introducir los parámetros de velocidad de barrido y cantidad de pasos por línea utilizados en un microscopio de fuerza atómica para determinar, a través de la visualización de su comportamiento en gráficos de salida, la manera en que afectan a la resolución cuando se varían, así como las limitaciones que puede presentar debido a sus componentes como la distancia mínima entre pasos que permiten los actuadores de la unidad de barrido.
- Determinar la señal de salida a través de la convolución de la señal de entrada con la función de transferencia, y así obtener el comportamiento del voladizo durante la simulación del análisis.

- Ejecutar la simulación bajo condiciones predeterminadas para validar los parámetros de entrada y salida para compararlos con otros programas computacionales utilizados en el área y resultados externos para validar la hipótesis.
- Relacionar los parámetros de medición en una muestra heterogénea determinada con la resolución y fidelidad de la imagen obtenida.

2. Marco teórico

2.1. Microscopio de fuerza atómica: componentes

El microscopio de fuerza atómica consta de una punta afilada que se monta en un dispositivo de barrido conocido como «escáner xyz», el cual permite posicionarlo en las direcciones x , y y z con precisión subatómica [43]. Se barre la punta sobre un área preestablecida y cada que detecta un cambio de relieve sufre una deflexión que es rastreada a través de un láser reflejado en su superficie y un sensor fotosensible llamado «fotodetector» (figura 2.1). Éste a su vez, manda las señales a un sistema de control, adquisición y procesamiento de datos que va almacenando los datos para formar la imagen de salida.

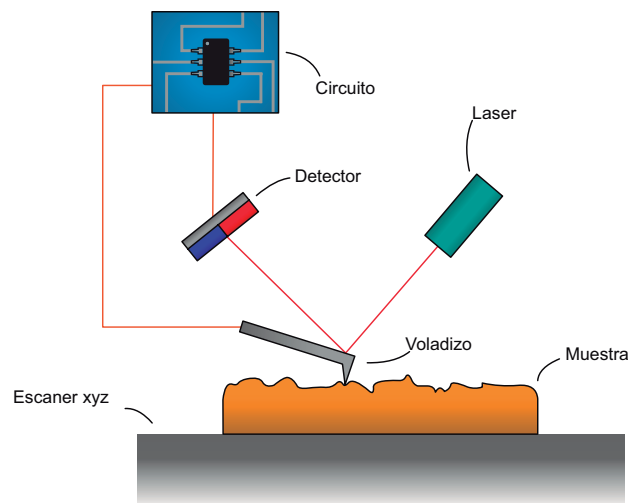


Figura 2.1: Componentes de un microscopio de fuerza atómica.

Para ejecutar el barrido, es necesario introducir parámetros de operación al microscopio, donde destacan la cantidad de pasos que dará a lo largo y ancho para recorrer toda el área de la muestra establecida y la velocidad con la que hará este recorrido

(velocidad de barrido). En un barrido típico suelen utilizarse de 64 a 512 pasos por línea [44], considerando que a mayor cantidad de pasos y menor velocidad de barrido, habrá mayor resolución en la imagen de salida.

2.1.1. Voladizo

En términos generales, el voladizo suele tener un largo de 50 a $500\mu m$, de 20 a $50\mu m$ de ancho y de 0.4 a $8\mu m$ de espesor [45]. Además con una rigidez que va de los 0.01 a los $50N/m$ y una frecuencia de resonancia de $1kHz$ a $1MHz$ [46].

En el lanzamiento del microscopio de fuerza atómica, el voladizo fue diseñado para trabajar en el modo de operación de contacto, lo que hacía necesario que la punta del voladizo fuera fabricada con materiales duros como el diamante para que la punta resistiera el arrastre sobre la muestra [9]. Actualmente, los materiales con los que se fabrica el voladizo son variados. Los más comunes son el silicio y el nitruro de silicio (Si_3N_4).

El material y dimensiones adecuadas del voladizo dependen de la muestra a analizar y del modo de operación bajo el que va a trabajar. Es a través de los extensos catálogos de voladizos donde se pueden ver aplicaciones en las que comúnmente se utilizan las diferentes combinaciones de parámetros:

- Para caracterizar en los modos de operación de no contacto y contacto intermitente es común encontrar voladizos con frecuencia de resonancia que va de los $190kHz$ a los $5000kHz$, con una rigidez de entre $3N/m$ y $42N/m$, fabricados de silicio y oro [47].
- En el modo de operación de contacto la frecuencia de resonancia va de $13kHz$ a $67kHz$, suelen tener una rigidez de $0.06N/m$ a $1.6N/m$, fabricados de silicio y nitruro de pyrex recubiertos de oro, plata y aluminio [48, 49].

Existen catálogos con secciones para aplicaciones más específicas como el análisis de muestras biológicas, de fuerzas magnéticas, barrido de alta velocidad, entre otros [50].

2.1.2. Fotodetector

Para obtener el ángulo de deflexión del voladizo que varía cada que se mueve a lo largo de la muestra, se incide un láser sobre su superficie y se miden los cambios de inclinación a través de un fotodetector [51]. Estos dispositivos se suelen dividir en cuadrantes (siendo los de 2 y 4 cuadrantes los más comunes) y dependiendo del cuadrante en el que incide el haz del láser, el fotodetector envía la señal al sistema de adquisición y procesamiento para almacenar los datos (figura 2.2).

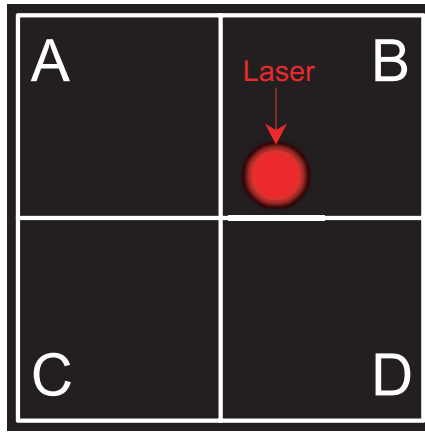


Figura 2.2: Fotodetector de cuatro cuadrantes con láser incidiendo en el cuadrante B.

2.1.3. Sistema de barrido

Existen al menos tres formas de barrer la punta sobre la superficie, manteniendo la muestra fija y moviendo el voladizo en los tres ejes [52], manteniendo fijo el voladizo y moviendo la muestra [53] y moviendo el voladizo en el eje z y la muestra en los ejes x y y [54].

La precisión con la que el sistema logra dar cada paso durante el barrido depende de los actuadores piezoeléctricos comúnmente utilizados para moverlo. Algunos de estos actuadores pueden tener un desplazamiento de hasta 1 nm por paso y desplazarlo en un volumen de hasta $400\mu\text{m} \times 400\mu\text{m} \times 200\mu\text{m}$ [55]. Por lo que es importante saber cual es su desplazamiento mínimo para estimar el límite de resolución máxima que se puede alcanzar con el equipo.

2.2. Modos de operación

2.2.1. Contacto

Fue el primer modo de operación utilizado en la microscopía de fuerza atómica [9], en este modo la punta del voladizo barre la superficie del material haciendo contacto directo. Esto hace necesario que la punta y la muestra sean de un material lo suficientemente duro para que no se dañen durante el barrido.

Ya que la punta debe de seguir toda la geometría de la muestra, la rigidez del voladizo debe de ser baja para que exista el mayor rango de movimiento posible sin que el voladizo se llegue a dañar.

Uno de los principales problemas en el modo de operación de contacto son las fuerzas laterales. Causando que, además de la deflexión vertical, haya una rotación en el eje horizontal del voladizo y genere ruido en las lecturas de su movimiento (figura 2.3). Debido a lo impredecible que puede ser este giro, es complicado implementar sistemas de control de retroalimentación para compensarlo.

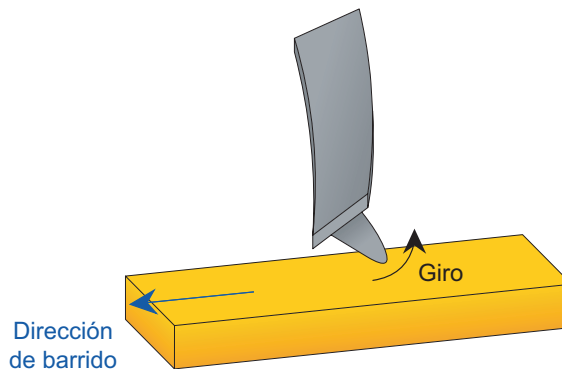


Figura 2.3: Giro del cuerpo del voladizo debido a las fuerzas laterales.

2.2.2. No contacto

El modo de operación de no contacto tiene la principal ventaja de analizar muestras susceptibles a ser dañadas por la punta del voladizo si entran en contacto. Es muy útil para caracterizar materiales blandos, como muestras biológicas [56].

Para barrer la superficie de la muestra en modo de no contacto, es necesario que existan fuerzas de interacción punta-superficie. Éstas se dan en distancias en las que

la fuerza es de atracción, y se puede visualizar dicha región en la curva del potencial de Lennard-Jones (figura 2.4). La región indicada en verde es el rango típico de distancias donde se ubica el voladizo para el modo de no contacto. Los valores de distancia dependen de los materiales de la punta y la muestra.

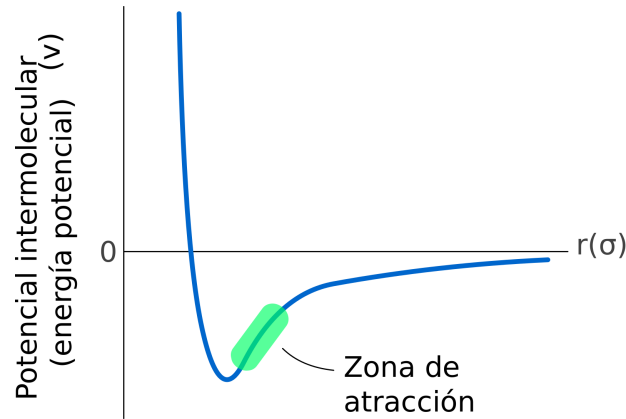


Figura 2.4: Zona de atracción en la curva del potencial de Lennard-Jones.

Dependiendo del modo de barrido, las fuerzas de interacción pueden o no representar la geometría de la superficie. En el caso de barrer a altura constante, estas fuerzas representan a la relación que tienen con la distancia de separación punta-muestra y la composición de sus materiales. Por lo que, por ejemplo, si la punta hace un barrido en una superficie completamente horizontal, pero la muestra está construida de distintos materiales, la señal de salida no se parecería a la geometría de la superficie de la muestra, generando un artefacto (figura 2.5).

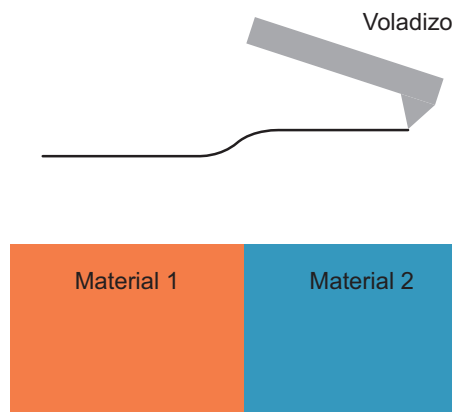


Figura 2.5: Artefacto en el barrido de muestras heterogéneas.

Si se emplea un sistema de control que efectúe un barrido a fuerza constante, este desplazará al voladizo sobre el eje vertical cada que sufra una deflexión, siendo este desplazamiento la información que se almacena y representa a la superficie de la muestra.

2.2.3. Contacto intermitente

En el modo intermitente se hace oscilar al voladizo con una frecuencia cercana a la de resonancia, haciendo que la punta suba y baje rápidamente y provocando un «picoteo» muy suave sobre la superficie de la muestra. En la curva del modelo del potencial de Lennard-Jones se puede interpretar que el voladizo en este modo de operación se mueve de la región de contacto a la de no contacto en cada cambio de posición (figura 2.6).

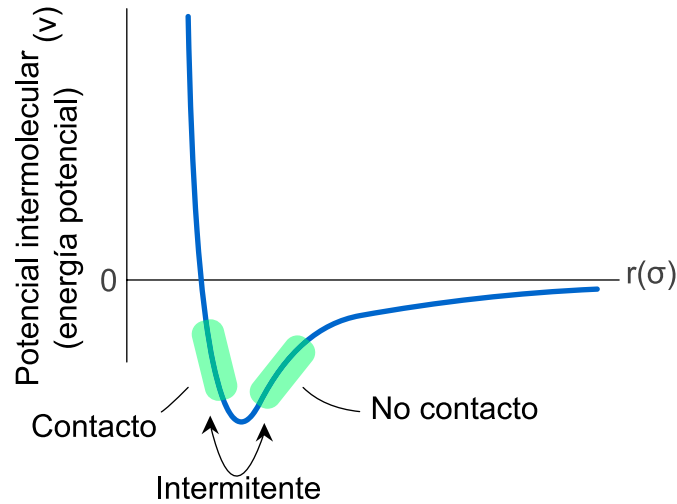


Figura 2.6: Regiones de los diferentes modos de operación de acuerdo a la distancia entre el voladizo y la muestra.

Una de sus principales ventajas frente al modo de operación de contacto, es que debido al reducido tiempo de contacto que hay entre la punta y la muestra, las fuerzas laterales que pudieran provocar ruido en la lectura no alcanzan a afectar de manera considerable el comportamiento del voladizo, por lo que se pueden descartar.

2.3. Artefactos

Los artefactos (o artificios, del inglés «artifacts») son datos dentro de la matriz de salida que no representan como es en realidad la superficie de la muestra. Estos defectos se dan por limitaciones geométricas, vibraciones, condiciones de operación no favorables para el análisis (temperatura, presión y medio), velocidad de barrido, ruido de los componentes electrónicos del microscopio, entre otros motivos (figura 2.7) [57].

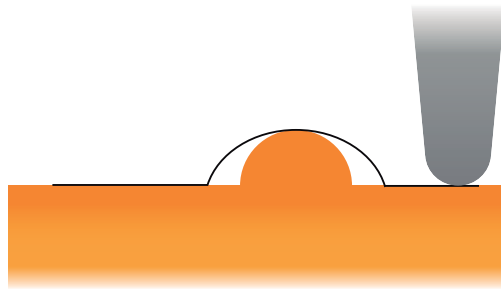


Figura 2.7: Artefacto debido a la convolución de la muestra y de la punta del voladizo.

Ya que no es deseable que se presenten en la señal de salida, se suelen implementar sistemas de control, filtros y algoritmos de post-procesamiento de señales para corregirlos. Sin embargo, existen límites intrínsecos para lograr una fidelidad perfecta en la imagen.

Los artefactos se presentan en todas las técnicas de caracterización, por lo que ninguno de los tres modos de operación del microscopio están exentos de ellos.

2.4. Simulación

El desarrollo de simuladores permite estudiar la técnica de microscopía de fuerza atómica, los componentes indispensables para caracterizar y como éstos se pueden comportar ante situaciones específicas.

La simulación vuelve accesible a las técnicas de caracterización para investigadores y entusiastas de distintas áreas, que no cuentan con los recursos necesarios para iniciarse en la técnica a través de la compra de los costosos equipos e insumos.

Es a través de lenguajes de programación como MATLAB, Python, R, entre otros, que programadores pueden desarrollar simuladores enfocados en análisis de datos para la caracterización.

La microscopía de fuerza atómica involucra el manejo de matrices de datos que se interpretan en forma de imágenes que representan al resultado de la caracterización. Partiendo de esto, simular el comportamiento de los componentes del microscopio implica el desarrollo de algoritmos que procesen datos y consideren los fenómenos físicos involucrados en la caracterización de la misma manera que un sistema real.

2.5. Control

Por medio del control, se busca que un sistema se comporte de una manera específica, siendo éste capaz de controlarse a sí mismo con el uso de sensores y actuadores [58].

Los sistemas de control del microscopio de fuerza atómica permiten efectuar operaciones tales como posicionamiento de alta precisión, distintos modos de barrido, oscilación modulada del voladizo para el modo de operación de contacto intermitente, entre otros [59].

En el caso del barrido, hay dos formas de efectuarlo: con distancia constante y fuerza constante. En el modo de distancia constante se mantiene fija la altura del voladizo, siendo la deflexión de este el que genera la señal de salida.

Para el modo de fuerza constante se busca que la deflexión del voladizo sea la misma en todo momento con ayuda del fotodetector y el sistema de posicionamiento. Para lograrlo, se establece un punto inicial en el fotodetector que debe de ser alcanzado por el láser (set point), generando que el sistema de posicionamiento desplace al voladizo hacia arriba o abajo para que el láser se mantenga en este punto.

3. Metodología

Los pasos para el desarrollo de la simulación son:

- Obtener la función de transferencia que describa el comportamiento del voladizo durante el barrido.
- Modelar superficies que representen a la muestra que se va a caracterizar a partir de formas preestablecidas.
- Calcular las fuerzas de interacción que se dan entre la punta del voladizo y la muestra, siendo estas la señal de entrada.
- Calcular los valores de masa, rigidez y amortiguamiento para obtener el comportamiento del voladizo para cada caso.
- Simular el barrido del voladizo en la señal de entrada y almacenar su comportamiento como señal de salida.
- Procesar la señal de salida para su representación gráfica y análisis.

3.1. Función de transferencia del voladizo

El modelo básico del comportamiento del voladizo es el sistema masa-resorte-amortiguador, donde se requiere identificar su masa efectiva, la rigidez y el coeficiente de amortiguamiento. Esta función de transferencia modela el comportamiento dinámico del voladizo con una carga puntual aplicada en el extremo libre.

Para obtener la función de transferencia se expresa el comportamiento de cada uno de los elementos del sistema masa-resorte-amortiguador y la fuerza ejercida por una carga externa que provoca que salga del reposo, $f(t)$

$$m \frac{d^2x}{dt^2} + b \frac{dx}{dt} + kx = f(t) \quad (3.1)$$

Usando la transformada de Laplace se obtiene

$$F(s) = X(s)(ms^2 + bs + k) \quad (3.2)$$

teniendo en cuenta que la función de transferencia $h(s)$ está dada por la relación de la señal de salida $X(s)$ y la de entrada $F(s)$, donde $F(s)$ puede ser cualquier entrada, se obtiene que

$$h(s) = \frac{X(s)}{F(s)} = \frac{1}{ms^2 + bs + k} \quad (3.3)$$

3.2. Modelado de la superficie de la muestra

La muestra a analizar está representada por una superficie en 3 dimensiones de material heterogéneo. Para modelar la superficie en MATLAB, se establecen variables, tales como el ancho (XT) y largo (YT) de la región a analizar, y las dimensiones espaciales $(x_i - x_{i-1})$, $(y_j - y_{j-1})$ y temporal de los pasos que realizará el barrido $t_b = (x_i - x_{i-1})/v_l$, donde v_l es la velocidad por línea de la matriz. Posteriormente, se establece la altura que tendrá cada una de los puntos de la muestra, estableciendo la diferencia entre el punto de altura máxima y la mínima, y estableciendo una distribución aleatoria (figura 3.2).

Así se genera una matriz de datos de tres dimensiones (x_i, y_j, R_{ij}) , que se puede expresar matemáticamente como en la ecuación 3.4.

$$R_{ij}(x_i, y_j) = Random_{x_i, y_j}(max, min) \quad (3.4)$$

Como se muestra en la figura 3.1

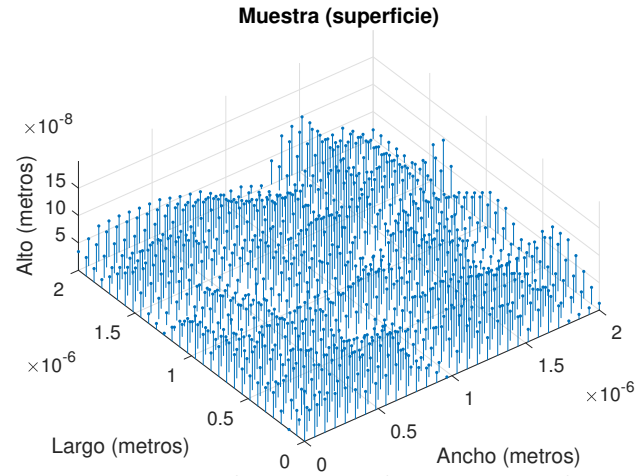


Figura 3.1: Matriz de puntos aleatorios en el espacio.

Se representa como una superficie, en la figura 3.2

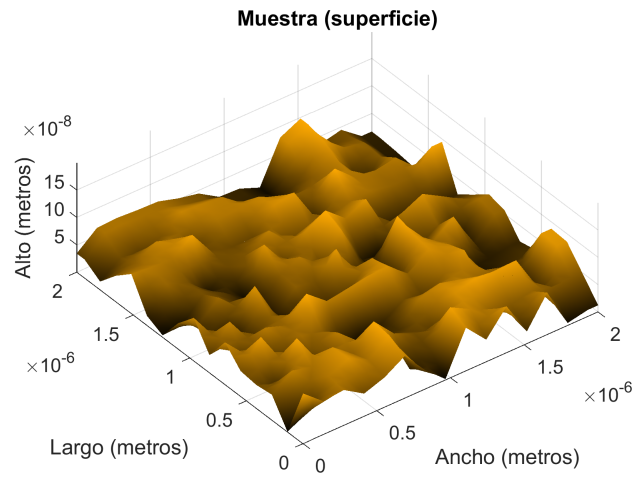


Figura 3.2: Superficie de valores aleatorios.

Para superficies escalonadas se toman grupos de regiones a las que se les establece el mismo valor aleatorio (figura 3.3).

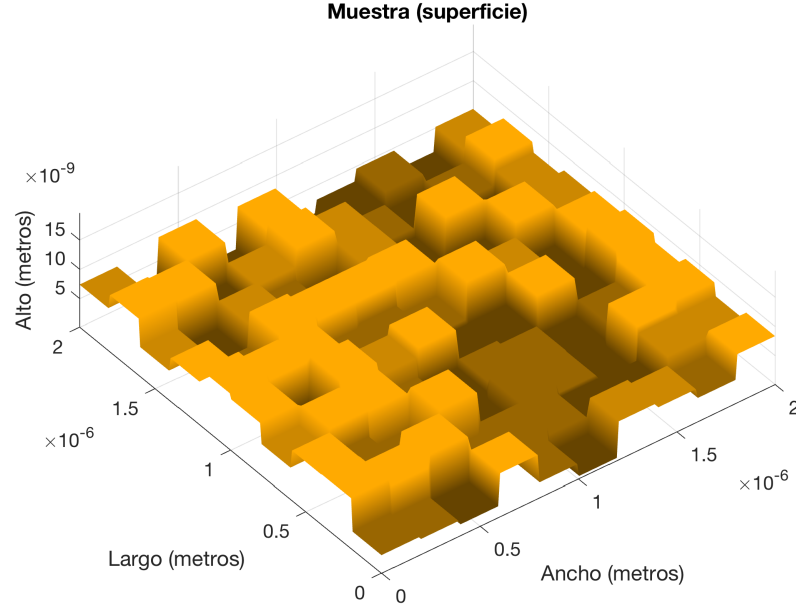


Figura 3.3: Superficie escalonada.

3.3. Cálculo de fuerzas de interacción

La señal de entrada no es la geometría de la superficie, sino la fuerza de interacción debida a las fuerzas de Van der Waals, que se determina a través del potencial de Lennard-Jones [60,61], calculando la fuerza de interacción entre un par de partículas, mediante la ecuación 3.5

$$F(r) = 4\epsilon \left(\frac{12\sigma^{12}}{r^{13}} - \frac{6\sigma^6}{r^7} \right) \quad (3.5)$$

siendo ϵ la energía potencial que hay entre las partículas que están interactuando y σ la distancia en la que el Potencial de Lennard-Jones es igual a cero, es decir, la suma de los radios de Van der Waals del par de partículas. La escala de magnitud la fuerza resultante, depende de la cantidad de sustancia que interactúa entre el voladizo y la superficie. Se especifica a través de ϵ , en J/mol por cada mol de sustancia o simplemente en *Joules* por cada par de partículas [62].

Sin embargo, ya que la geometría tanto de la punta como de la muestra influyen en esta interacción, se tiene que ajustar el modelo. En este caso, se considera que la punta

es piramidal con una semiesfera en el extremo y la superficie es un plano (figura 3.4).

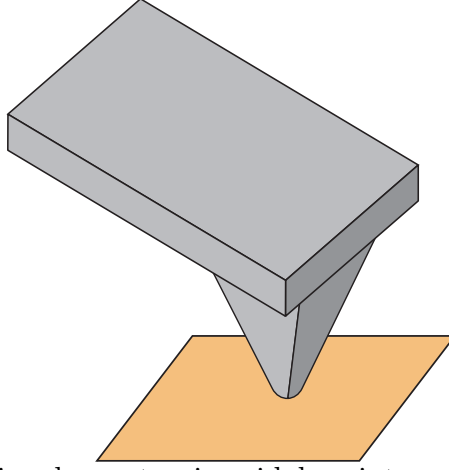


Figura 3.4: Voladizo de punta piramidal en interacción con un plano.

La punta piramidal con una semiesfera se dimensiona como se muestra en la figura 3.5.

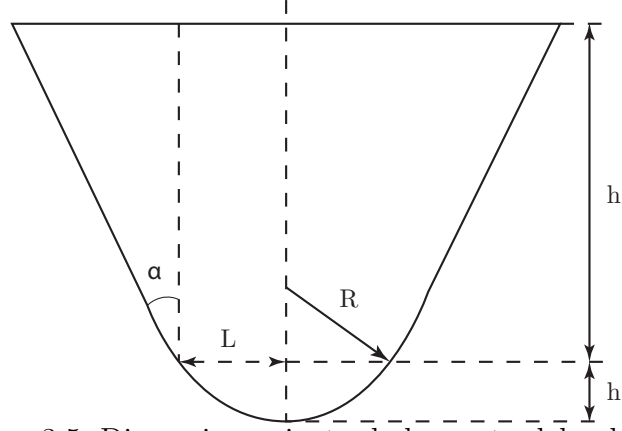


Figura 3.5: Dimensionamiento de la punta del voladizo.

Formando una ecuación que considera tanto a las fuerzas de Van der Waals, la geometría de los elementos que se encuentran en interacción y a la distancia que las separa (ecuación 3.6) [63].

$$F(r) = -\frac{H}{6} \left(\frac{h^2(3Rr + Rh - dh)}{r^2(r + h)^3} + \frac{L^2}{(r + h)^3} + \frac{4\beta L + \beta(r + h)}{\pi (r + h)^2} \right) \quad (3.6)$$

Donde H es la constante de Hamaker, r es la distancia que separa a la punta y la muestra, $\beta = \tan(\alpha)$ y $L = R\cos(\alpha)$.

Se obtiene una nueva matriz que representa la señal de entrada al sistema donde, por ejemplo, si se consideran 100 pasos a lo largo y ancho de la muestra, se obtiene una

superficie de fuerza como la de la figura 3.6.

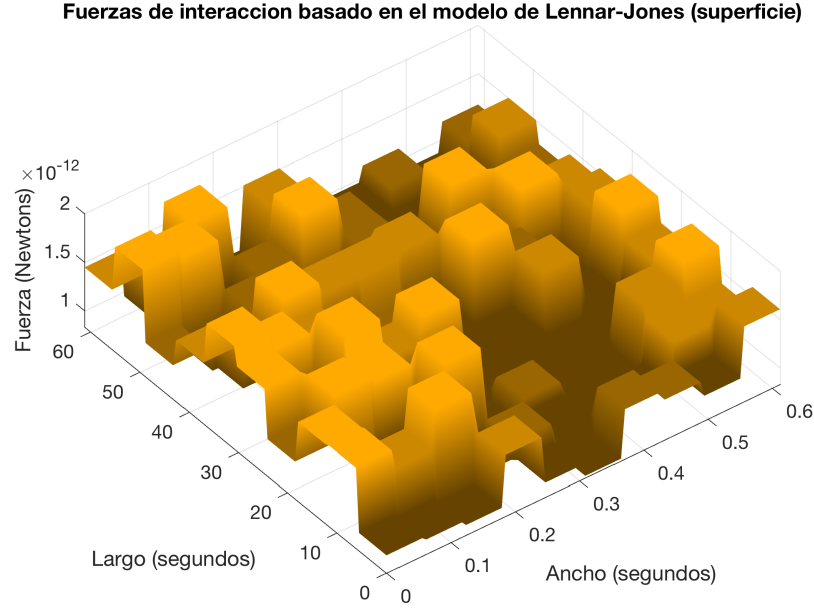


Figura 3.6: Señal de entrada.

3.3.1. Constante de Hamaker

La constante de Hamaker (A) describe las interacciones entre partículas y sustratos considerando los elementos que las forman y el medio en el que se encuentran inmersos [64], siendo una medida cuantitativa de las interacciones de Van der Waals para el cálculo de fuerzas de atracción o repulsión que hay entre ambas partes.

En la ecuación 3.6, la constante de Hamaker permite diferenciar los materiales que están interactuando entre la punta y la muestra.

En la literatura se reportan tablas con los valores de la constante de Hamaker [65] para diferentes pares de partículas en distintos medios (tabla 3.1).

Material del voladizo	Material de la muestra	Medio	Hamaker ($\times 10^{-20}$ J)
Silicio	Silicio	Aire	18.65
Silicio	Silicio	Agua	9.75
Si_3N_4	Si_3N_4	Aire	16.7
SiO_2	SiO_2	Aire	6.5
SiO_2	Plata	Aire	11.12
SiO_2	Cobre	Aire	11.6
Plata	Plata	Aire	38.5
Plata	Cobre	Aire	22.45

Tabla 3.1: Valores de la constante de Hamaker para diferentes combinaciones de materiales en el voladizo y la muestra en distintos medios

3.4. Análisis de la señal de entrada

De acuerdo a la forma en que el usuario ingrese los parámetros de operación, geometría y propiedades del voladizo, se toman distintas rutas que coinciden en el cálculo de las tres variables de la función de transferencia. Es decir, simular el comportamiento del voladizo ante cualquier señal de entrada $x(t)$, implica determinar su masa, constante del resorte y coeficiente de amortiguamiento viscoso.

La masa se obtiene a través de la ecuación 1.1, con la rigidez y la frecuencia de resonancia del voladizo. La rigidez está relacionada con la geometría del voladizo y el módulo de Young (E) del material (ecuación 3.7) [66]

$$k = \frac{EWh^3}{4L} \quad (3.7)$$

donde W es el ancho del voladizo, h el espesor y L el largo. El coeficiente de amortiguamiento viscoso y el coeficiente de amortiguamiento están relacionados con la ecuación 1.2 y, este último a su vez con el factor de calidad Q del voladizo a través de la ecuación 3.8 [67]

$$\xi = \frac{1}{2Q} \quad (3.8)$$

Una vez obtenidos los parámetros, se logra visualizar $g(t)$ ante cualquier fuerza externa

a través de la respuesta al impulso unitario

$$g(t) = h(t)\delta(t) \quad (3.9)$$

Donde $\delta(t)$ es el impulso unitario en el dominio del tiempo. Se puede visualizar esta respuesta considerando, por ejemplo, propiedades comerciales de un voladizo de dióxido de silicio (SiO_2), como $m = 4.672 \times 10^{-8} kg$, $k = 0.2 N/m$ y $b = 9.66 \times 10^{-7} \frac{N}{m/s}$ en la figura 3.7.

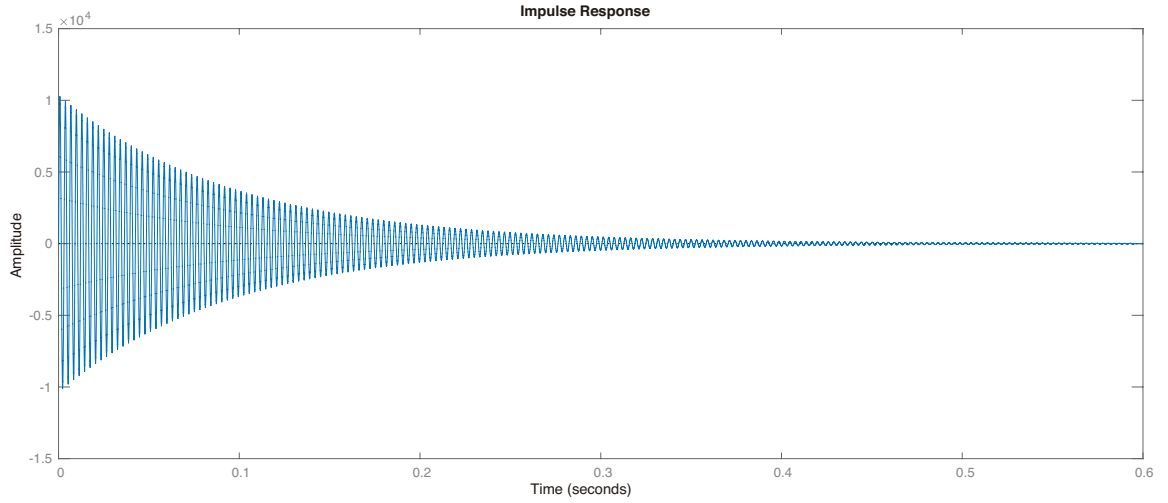


Figura 3.7: Respuesta al impulso unitario de la función de transferencia.

Al sustituir los valores de m , k y b en la función de transferencia se obtiene el tipo de amortiguamiento que tendrá ese voladizo con propiedades específicas ante cualquier cambio de relieve y, a la vez, se prepara para procesar, a través de la convolución, a la señal de entrada $x(t)$ y obtener la señal de salida $y(t)$, simulando el barrido de la punta sobre la superficie.

3.4.1. Convolución

Considerando al sistema de masa-resorte-amortiguador como lineal e invariante en el tiempo se tiene que $h(t)$ es la respuesta de ese sistema a un impulso unitario en la entrada, representada por $x(t)$, con condiciones iniciales iguales a cero. Donde, además, $y(t)$ es la respuesta del mismo sistema a una excitación causal arbitraria, con condiciones iniciales iguales a cero. Ver figura 3.8.

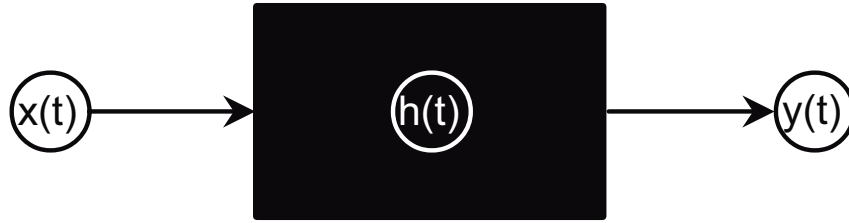


Figura 3.8: Diagrama de bloques básico de un sistema lineal para el análisis de señales.

$y(t)$ está dada por la convolución [68], que se expresa

$$y(t) = \int_0^t x(\tau)h(t - \tau)d\tau \quad (3.10)$$

Al introducir un sistema de control, sería necesario obtener los espacios de estado para determinar el comportamiento del sistema en un tiempo determinado.

3.5. Señal de salida

El resultado del barrido es la señal de salida $y(t)$ que se puede representar en su versión de superficie. Tomando como referencia a la señal de entrada de la figura 3.6 (obtenida de una superficie de rugosidad de 5.23 nm de SiO_2), caracterizada con el voladizo cuyo comportamiento se representó en la figura 3.7 y a una velocidad de barrido de $3.26 \mu\text{m/s}$, se obtiene una señal de salida (procesada) como la que se muestra en la figura 3.9

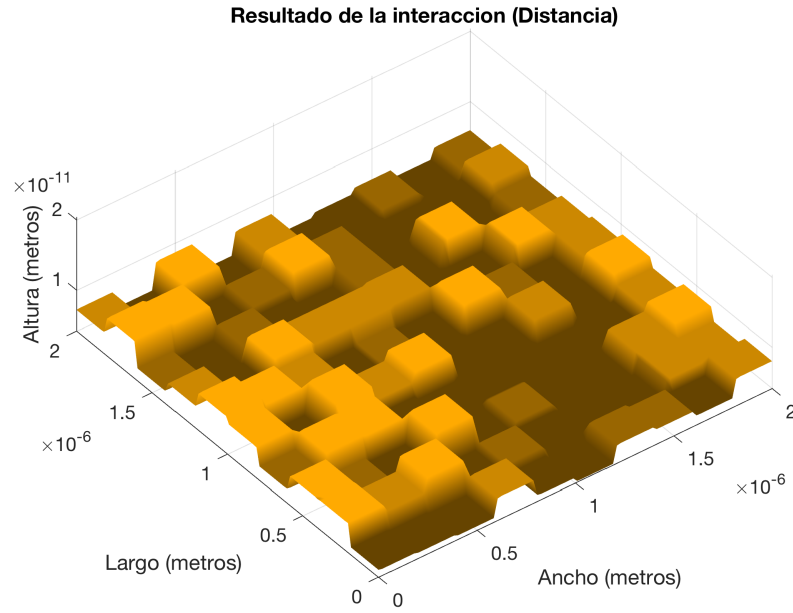


Figura 3.9: Señal de salida procesada.

Es común ver los resultados en gráficos de perfiles, donde se visualiza el barrido por cada línea que forma la superficie (figura 3.10).

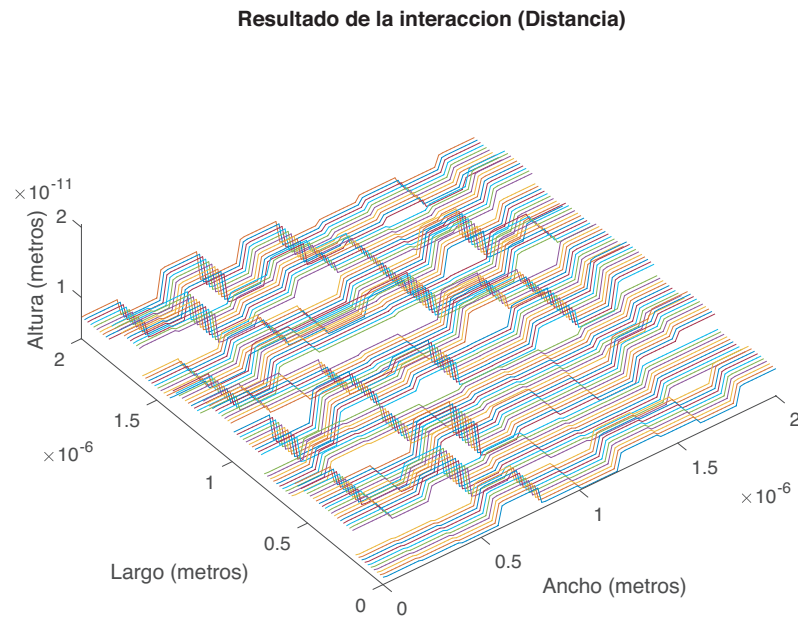


Figura 3.10: Perfiles de la señal de salida.

De la señal de salida se puede crear una propuesta de superficie para concluir si los parámetros de operación del microscopio fueron los óptimos, cuando se realiza la comparación con la muestra original. Si la velocidad de barrido, el número y la longitud

de los pasos aplicados para analizar la superficie fueron los correctos para obtener una imagen de buena resolución o hay que modificarlos (figura 3.11).

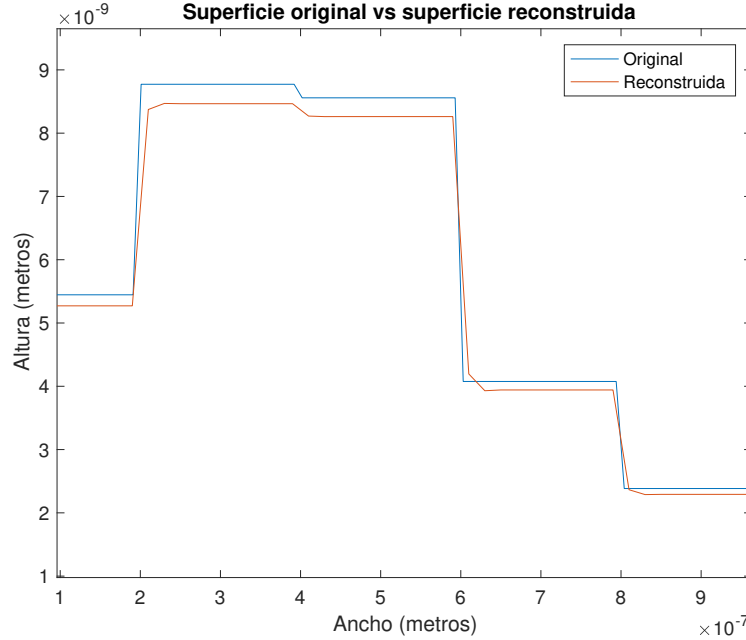


Figura 3.11: Comparación de la superficie original y la reconstruida.

Es importante considerar que variar los parámetros de operación con solo estimaciones puede llevar a simular sistemas que no son reales, por lo que es recomendable ajustarlos en base a datos estándar.

3.5.1. Representación en dos dimensiones

Cuando se obtienen resultados de un análisis de microscopía, se puede visualizar una imagen en dos dimensiones donde cada pixel representa un paso del actuador y la lectura de la interacción punta-superficie correspondiente. A estas interacciones se le asigna un rango de colores para diferenciar las zonas donde el voladizo experimentó mayor y menor fuerza que suelen ir de café (para zonas más bajas) a amarillo (para zonas más altas) o de amarillo a rojo, respectivamente.

Para la representación de esta imagen a partir de los resultados de la simulación, se toman los valores de la matriz de la señal de salida y de acuerdo al rango de altura correspondiente a cada valor se le asigna un color, de esta forma se va formando pixel a pixel la imagen de salida (ver figura 3.12).

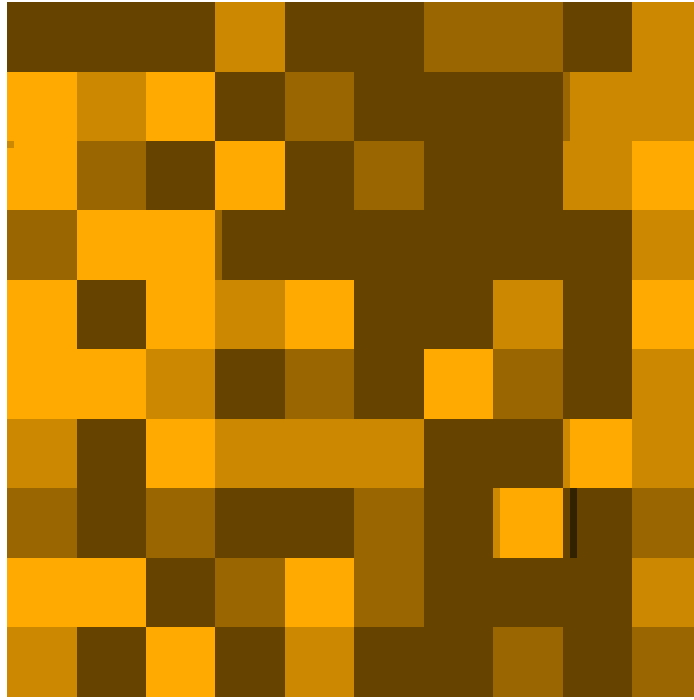


Figura 3.12: Señal de salida desde la vista superior.

4. Resultados

4.1. Algoritmo de generación de la superficie de la muestra

Para poner a prueba el modelo de la función de transferencia, es posible generar distintos tipos de topografías a través de algoritmos (propios de cada tipo de superficie) para generarlas. Sin embargo, hay propiedades que todas las topografías tienen en común: largo y ancho de la muestra, altura máxima y mínima de los relieves y la cantidad de puntos que formarán la superficie a lo largo y ancho. Al establecerlos, se usa el algoritmo correspondiente para generar la muestra seleccionada por el usuario.

Los tipos de muestras que se modelaron para esta simulación son:

- Superficie con picos de valores aleatorios.
- Superficie con escalones de valores aleatorios.
- Superficie con escalones de valores aleatorios y pequeñas subdivisiones escalonadas.
- Superficie externa.

4.1.1. Superficie de valores aleatorios

La superficie de valores aleatorios es la más sencilla de generar, pero con la que es más complicado visualizar los resultados debido a sus relieves. Para formarla, se generan valores aleatorios entre el valor máximo y mínimo de altura para la cantidad de puntos que el usuario predefinió, quedando una superficie con relieves en forma de picos (ver figura 3.2). El algoritmo se representa en la figura 4.1.

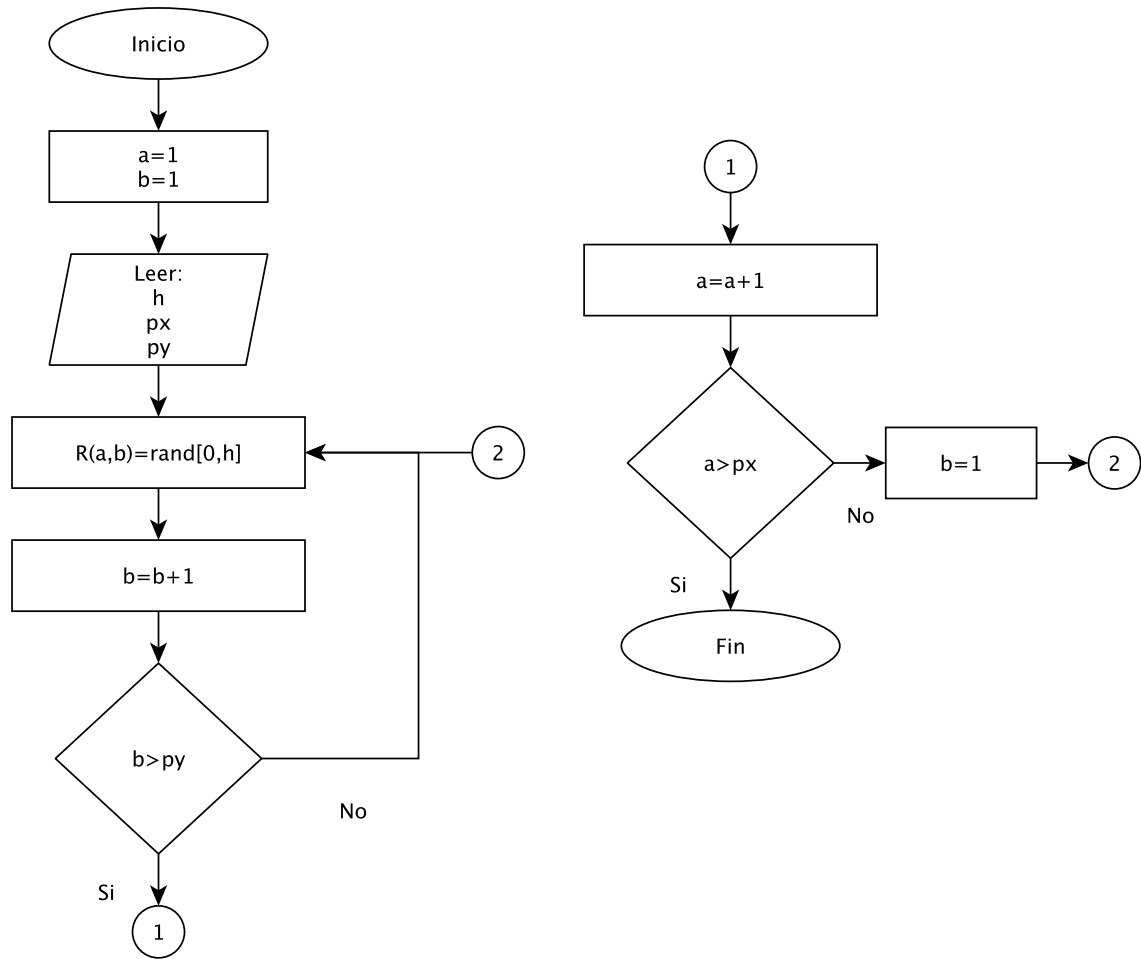


Figura 4.1: Diagrama de flujo del algoritmo para la generación de la gráfica de valores aleatorios.

Donde px y py son la cantidad de puntos a lo ancho y largo de la muestra; h , el valor de altura máxima; a y b son contadores para colorar el valor aleatorio en la posición que le corresponde y $R(a, b)$ la matriz de datos.

4.1.2. Superficie con escalones de alturas aleatorias

El enfoque de esta superficie es tener una mejor visualización de los resultados, ya que en cada cambio de escalón se aprecia el amortiguamiento del voladizo y los artefactos debido a las limitaciones geométricas. Se genera estableciendo las dimensiones que tendrá cada escalón y la altura máxima que pueden tener. En base a estos parámetros se dividen la cantidad de puntos totales que tiene la superficie de acuerdo a sus medidas

y se hacen iteraciones para que, la cantidad de puntos que representan las dimensiones de cada escalón tengan la misma altura y se repitan a lo largo y ancho para formar cada uno de los relieves de la superficie (figura 3.3). El diagrama de flujo de su algoritmo se muestra en la figura 4.2.

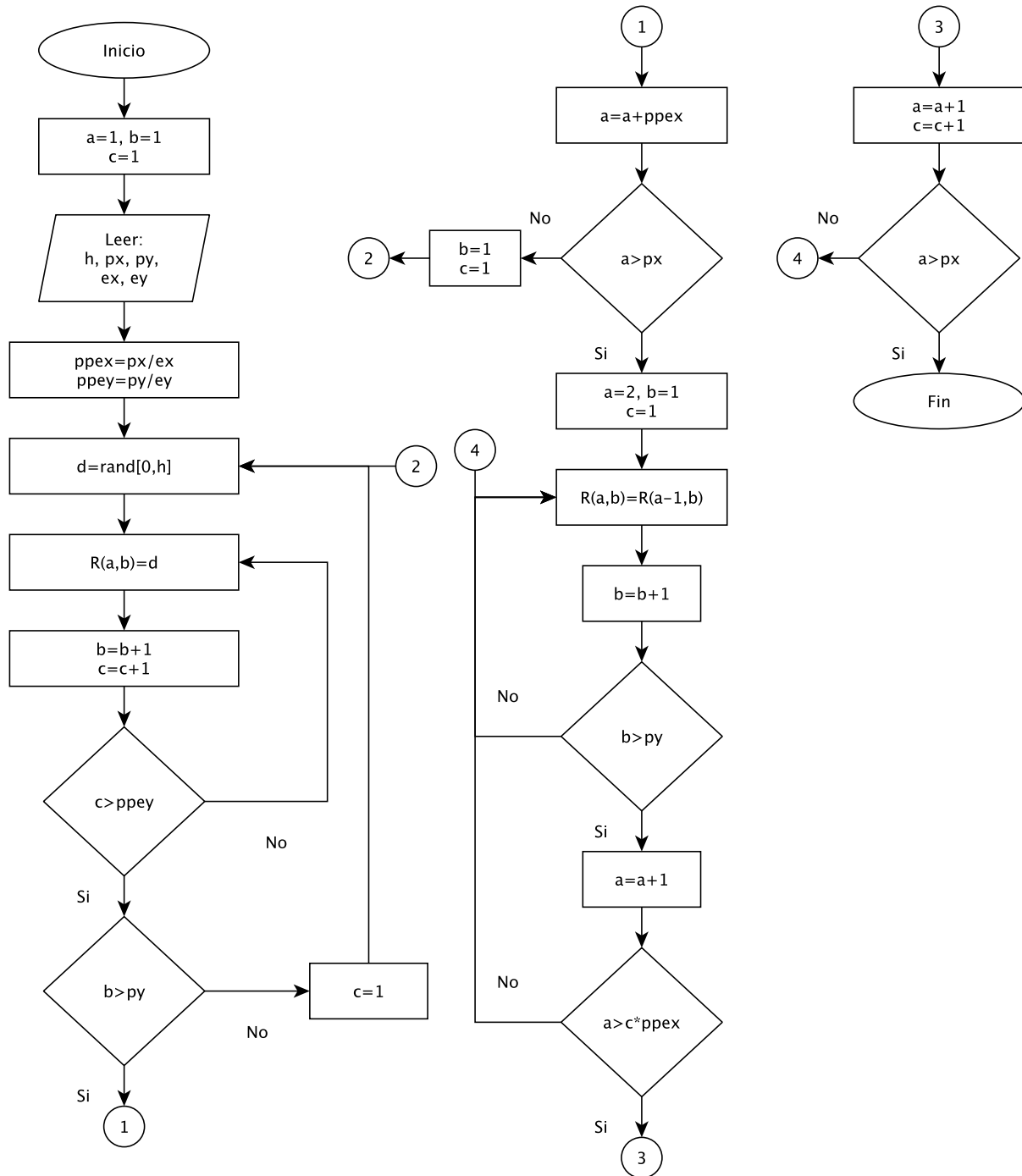


Figura 4.2: Diagrama de flujo de algoritmo para generar muestra escalonada.

Adicional a las variables utilizadas en el algoritmo de la superficie de valores aleatorios (figura 4.1), en este caso se utiliza a *ex* y *ey* donde el usuario especifica la cantidad de escalones a lo ancho y largo que tendrá la muestra y en las variables *ppex* y *ppey* se almacenan la cantidad de valores que formarán a cada escalón.

4.1.3. Superficie con escalones de alturas aleatorias y subdivisiones escalonadas

Para identificar con mayor claridad visual aspectos de la resolución se modeló una superficie con dos periodos de cambio de relieve para observar cuando se pierde uno de ellos (como la de valores aleatorios) y que, a la vez, permite visualizar el comportamiento del voladizo (como en la escalonada). Es una superficie escalonada con subescalones de ancho y profundidad variable, generando una superficie tan compleja como el usuario lo especifique.

Para darle forma, se repite el mismo algoritmo que la superficie escalonada y posteriormente se hacen iteraciones dentro de cada escalón para cambiar los valores de altura de la cantidad de puntos indicados. Por lo que el algoritmo para formar los subescalones es como el de la figura 4.3

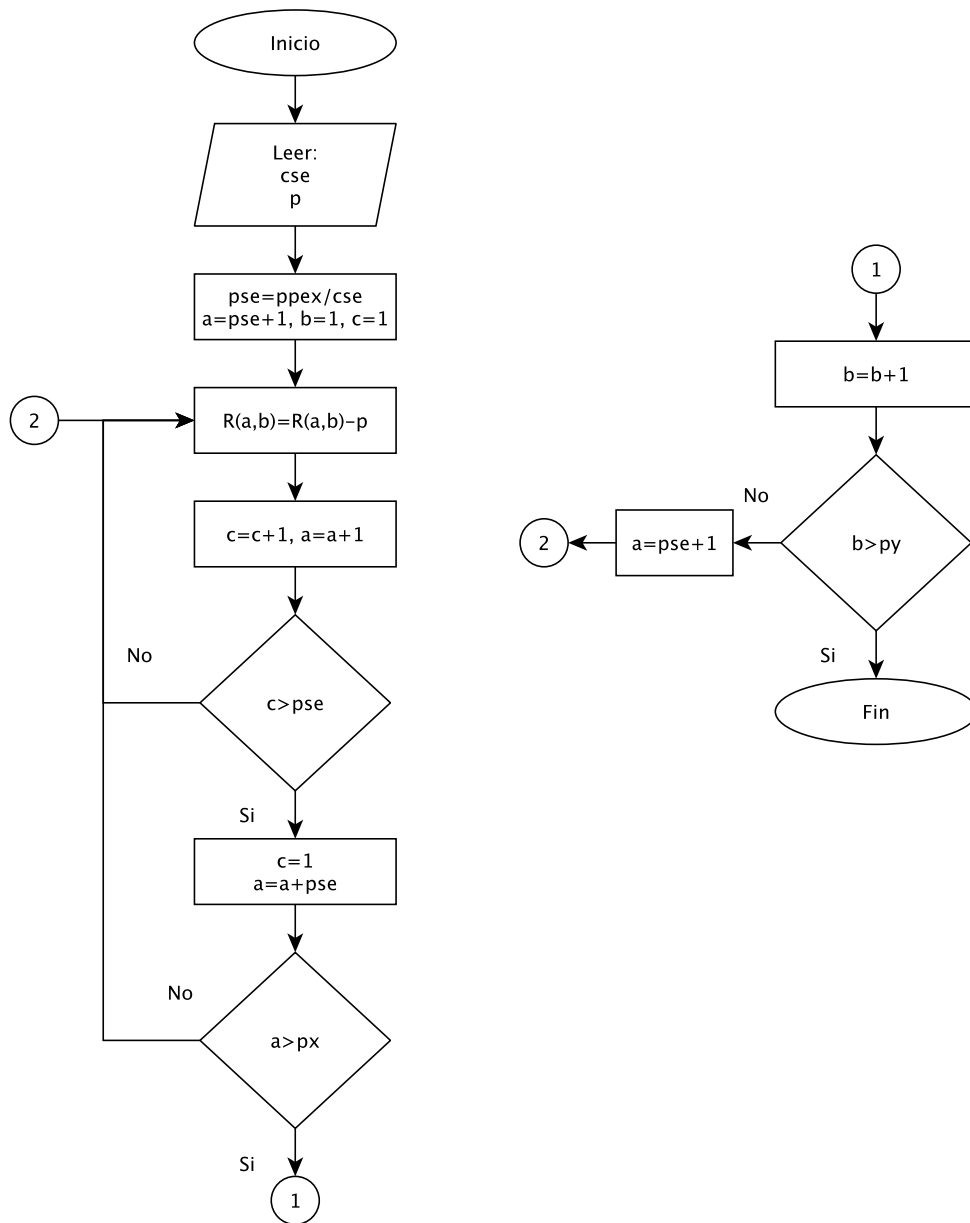


Figura 4.3: Diagrama de flujo de algoritmo para generar muestra con subescalones.

Formando una superficie como se muestra en la figura 4.4

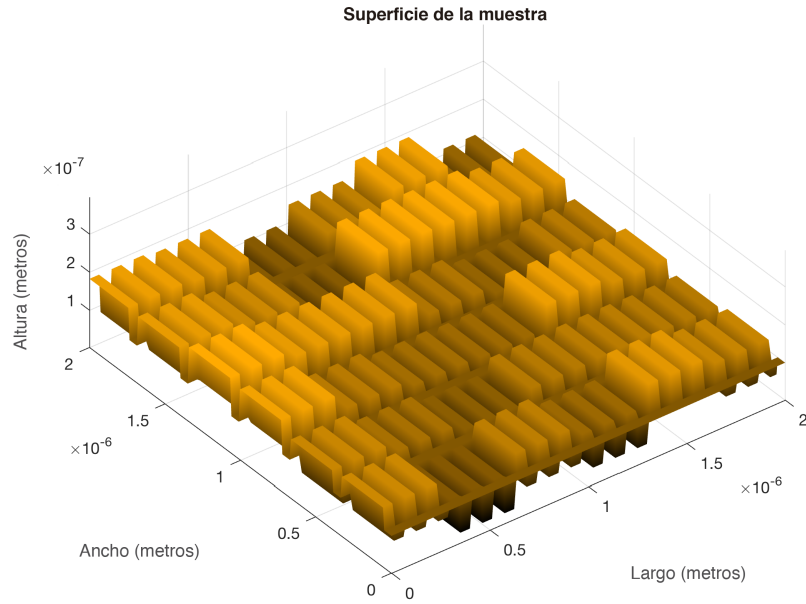


Figura 4.4: Muestra con subescalones.

4.1.4. Superficie externa

Buscando abrir la posibilidad al usuario de diseñar superficies bajo sus propios criterios y necesidades, existe la opción de importar archivo de datos (.dat) donde se contengan todos los valores de las alturas de los puntos que forman a la muestra. Adicionalmente, es necesario especificar la escala, el ancho y largo de la muestra para que quede completamente definida. Posteriormente, el programa trata los datos de la muestra de igual manera que los de las demás superficies.

4.2. Algoritmo de generación de señal de entrada

La señal de entrada está representada por la fuerzas de interacción del voladizo con la muestra. Por lo que, inicialmente se debe establecer la ubicación de los puntos donde se dará dicha interacción, calculando (con un algoritmo) las coordenadas de estos puntos a partir de la cantidad de pasos y la cantidad de líneas en que se repartirán. A pesar de que se conoce la cantidad de puntos a lo largo y ancho de la matriz que forma a la muestra, los puntos de interacción deben ser independientes de la ubicación

de ellos y, una vez localizados, se calcula el área de contacto punta-muestra trazando una circunferencia sobre la matriz de la muestra, se obtiene la distancia entre el centro de la circunferencia (ubicación del voladizo sobre la muestra) y los puntos del área que cubren cada uno de los puntos de la matriz. Es decir, debido a que la matriz de la muestra resulta estar formada por puntos discretos, quedan espacios vacíos entre punto y punto, por lo que se considera que la mitad de la distancia entre cada punto (tanto a lo largo como a lo alto) pertenece al primero y la otra mitad al siguiente (figura 4.5).

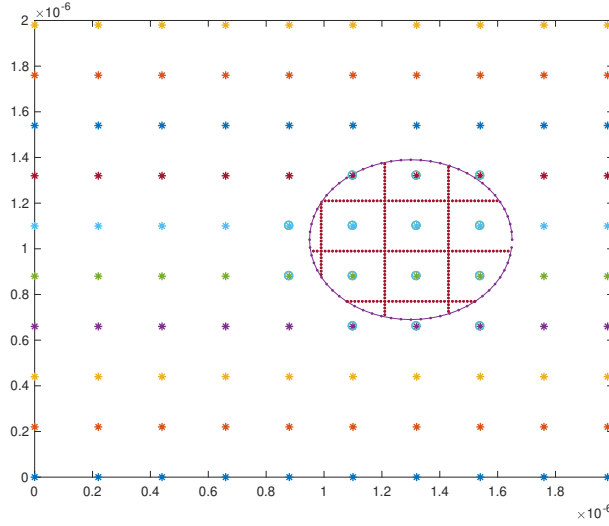


Figura 4.5: Distribución de áreas correspondientes a cada punto de la matriz de la muestra.

Con esta comparación se obtiene la proporción del área de cada uno de los puntos que logra quedar dentro de la circunferencia del área de contacto.

La altura, el material (determinado por la constante de Hamaker, A) y la proporción de área de los puntos de la muestra que entran en contacto con la punta del voladizo son las variables requeridas para determinar la fuerza de interacción entre el voladizo y la muestra, independientemente de las posibles variaciones de parámetros que pueda haber entre los puntos que interactúan con el voladizo (figura 4.6).

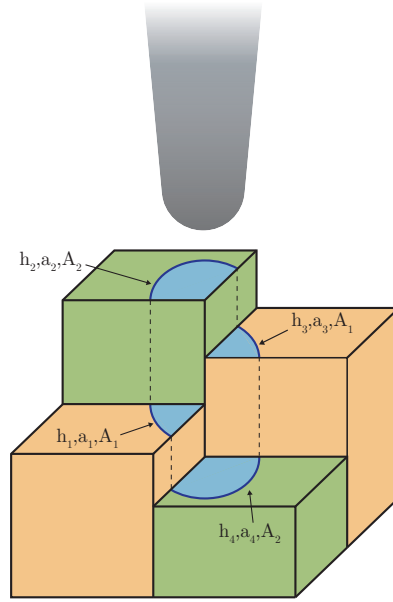


Figura 4.6: Interacción por secciones del área de contacto.

Ya que las áreas están construidas por puntos en el espacio, la similitud de su geometría comparada con una figura ideal depende de la cantidad de puntos que la forman. Es decir, entre mayor cantidad de puntos se utilicen para cada área, más preciso será el cálculo de fuerzas de interacción pero mayor será el tiempo de procesamiento de datos y viceversa.

4.2.1. Escalonado de la señal de entrada

Considerando que el voladizo se desplaza a pasos, se modifica la señal de entrada para que esta represente el tiempo de espera que hay en cada punto. Esto se hace convirtiendo cada valor de fuerza de la señal de entrada en un escalón con una duración equivalente a la relación de la cantidad de pasos y tiempo total por línea, es decir

$$t_{paso} = \frac{t_{linea}}{N_{pasos}} \quad (4.1)$$

Obteniendo una señal como la de la figura 4.7.

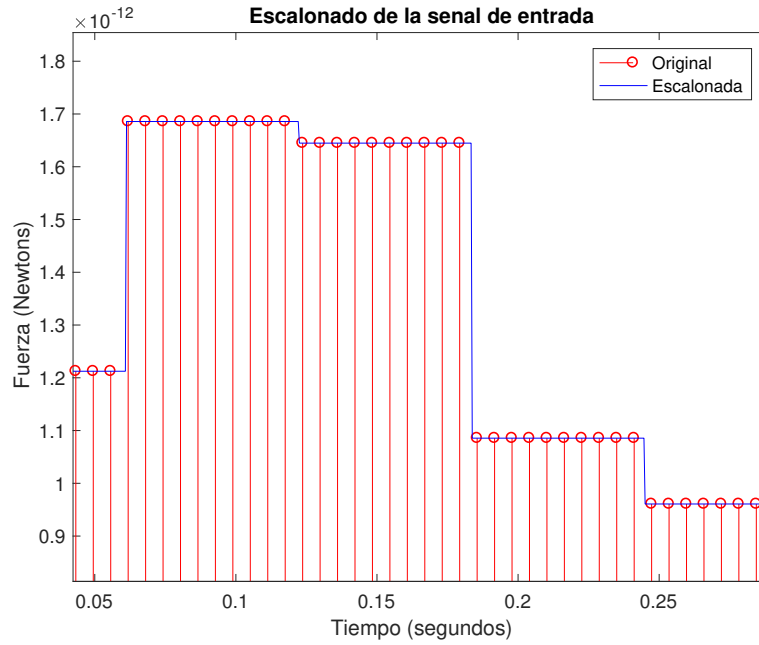


Figura 4.7: Escalonado de la señal de entrada.

4.3. Algoritmo de análisis

De acuerdo al funcionamiento general de la simulación (representado en la figura 3.8), lo siguiente es obtener la respuesta de la función de transferencia a la entrada. Para esto, se obtienen todos los parámetros introducidos para modelar el voladizo (masa, rigidez y amortiguamiento) y determinar bajo que tipo de amortiguamiento se registrará su comportamiento (figura 3.7).

Posteriormente, es necesario organizar la matriz que contiene los datos de las fuerzas de interacción en un vector que será convolucionado con la función de transferencia y se almacena la señal de salida en otro vector con las mismas dimensiones del de la señal de entrada (figura 4.8).

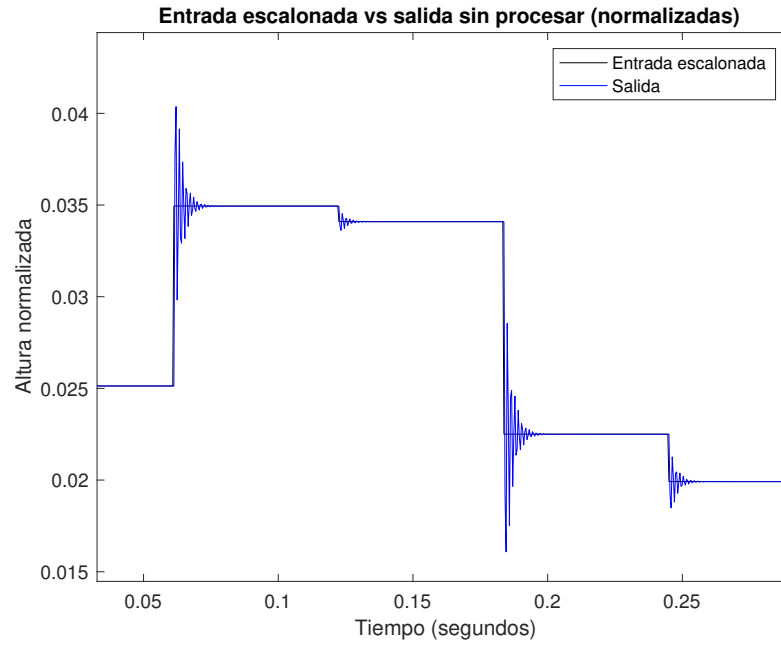


Figura 4.8: Señal de salida sin procesar

4.4. Procesamiento de la señal de salida

El análisis por escalones es útil para procesar los datos representando el tiempo de espera en cada paso, es decir, cada escalón representa el tiempo que dura estático el voladizo analizando cada región. Por lo que, se debe procesar esta señal para representar a la de salida en la superficie que se esperaría. Para esto se promedian los valores del comportamiento dado en cada escalón, obteniendo un vector que puede ser comparable con la señal de entrada (figura 4.9).

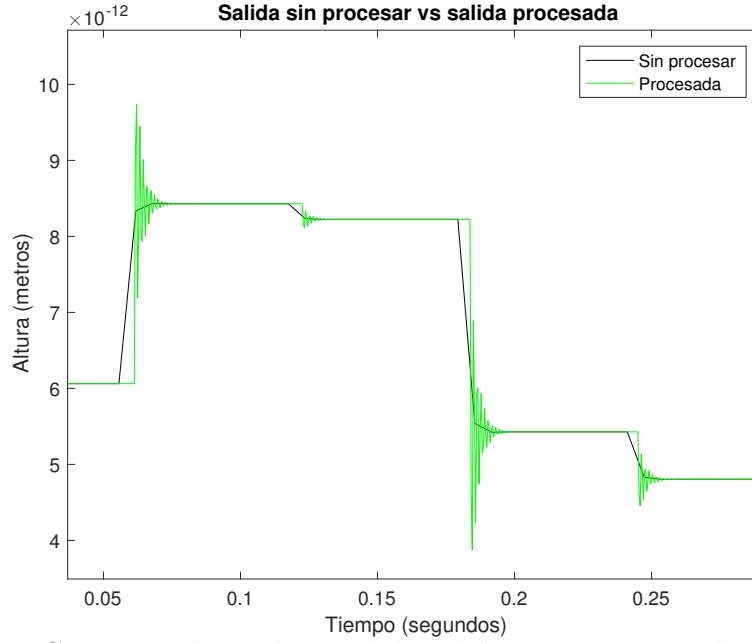


Figura 4.9: Comparación de la señal de salida sin procesar y la procesada.

Manejar los datos en forma de vector solamente es útil para el procesamiento de datos, por lo que, se genera otra matriz del mismo largo y ancho de la señal de entrada que representa a la señal de salida (figura 3.9).

4.5. Reconstrucción de la muestra

Tomando en cuenta que al analizar una muestra con el AFM lo que se busca es formar una imagen de su superficie, se debe de tomar la deflexión obtenida de la interacción punta muestra (señal de salida) y, a partir de ella, reconstruir una propuesta de esta superficie.

4.6. Deflexión a fuerza

A partir de la ley de Hooke se obtiene la relación de la deflexión que sufrió el voladizo con la fuerza necesaria para que esto ocurriera (ecuación 4.2).

$$F = k * y \quad (4.2)$$

Donde y es cada valor de deflexión de la señal de salida y k la rigidez del voladizo.

Enseguida, se hace una iteración para cada valor de deflexión y se obtiene una nueva matriz de fuerza que corresponderá en forma con la señal de salida y en magnitud con la señal de entrada (figura 4.10).

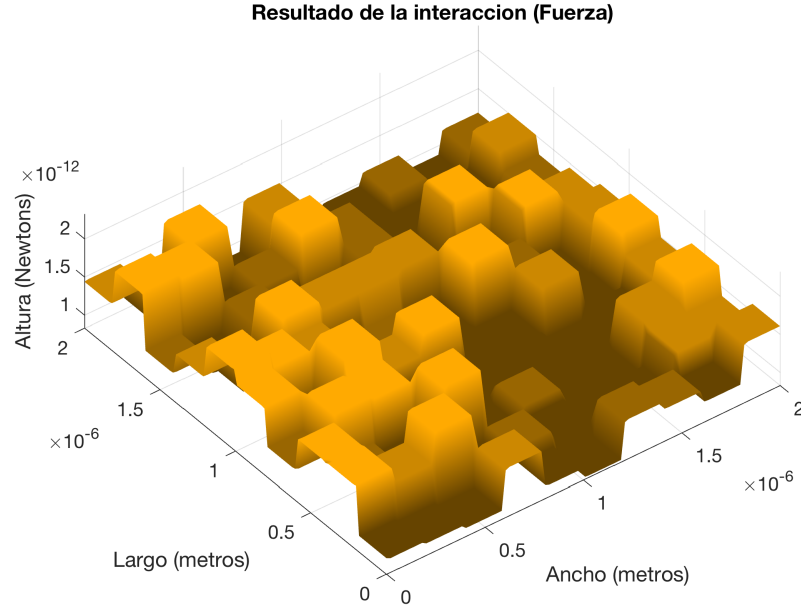


Figura 4.10: Imagen de fuerza formada a partir de la deflexión del voladizo.

4.7. Fuerza a altura

La matriz de fuerza formada se utiliza para determinar la distancia a la que se encontraba el voladizo en cada uno de los pasos dados durante el análisis. Es decir, se hace el proceso inverso al calculo de fuerzas de interacción con el modelo de la ecuación 3.6.

Para lograrlo, se hace uso de la función «*vpasolve*» de MATLAB, que soluciona la ecuación 3.6 para r y obtiene sus raíces, considerando los valores de fuerza y A de cada punto. Se selecciona la raíz adecuada sustituyendo cada una de ellas en la ecuación 3.6, se comparan con el valor de fuerza obtenido con la ecuación 4.2 y se toma la del valor más aproximado.

Con la nueva matriz de distancias punta-superficie de cada paso se propone la geometría de la muestra considerando que la distancia mayor es la que se da con el relieve

más bajo y la menor con el más alto. Tomando esto en cuenta, se invierte la señal y se hace un desplazamiento positivo igual a la distancia mayor (figura 4.11).

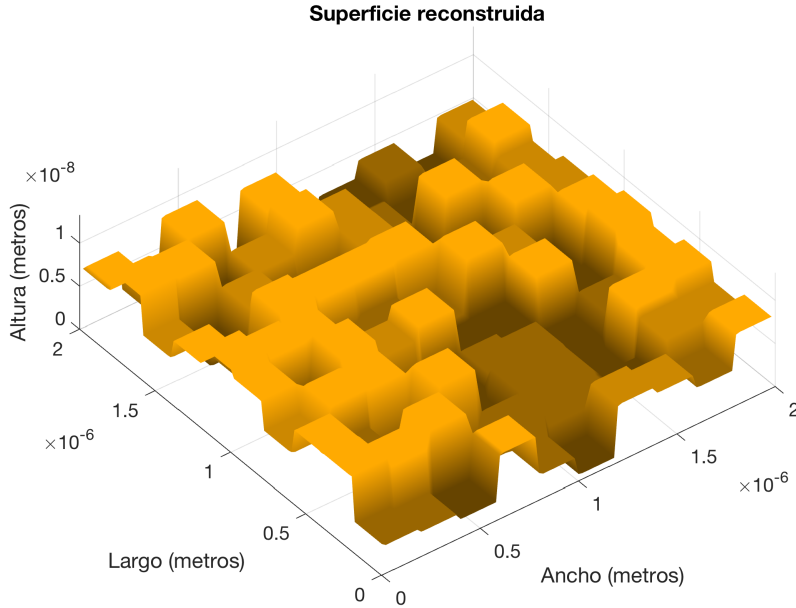


Figura 4.11: Superficie reconstruida basada en la señal de fuerza.

4.8. Interpretación de resultados

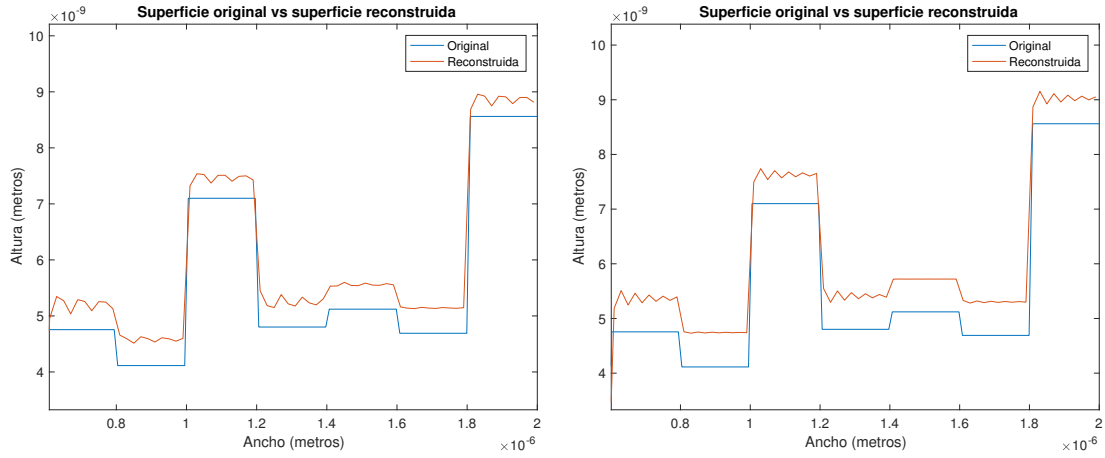
4.8.1. Resolución

Uno de los principales objetivos es obtener los parámetros de operación del microscopio idóneos para cada análisis, tomando en cuenta la diferencia en resolución que se obtiene cambiando sus valores y la esperada.

A pesar de la cantidad de variables que se pueden introducir al simulador, las únicas que el usuario varía entre una simulación y otra, son la velocidad de barrido y la cantidad de pasos que se darán a lo largo y ancho durante el análisis. Esto debido a que, tanto la muestra como el voladizo tienen características que no se pueden cambiar durante la experimentación (a menos que se cambie de muestra y/o voladizo).

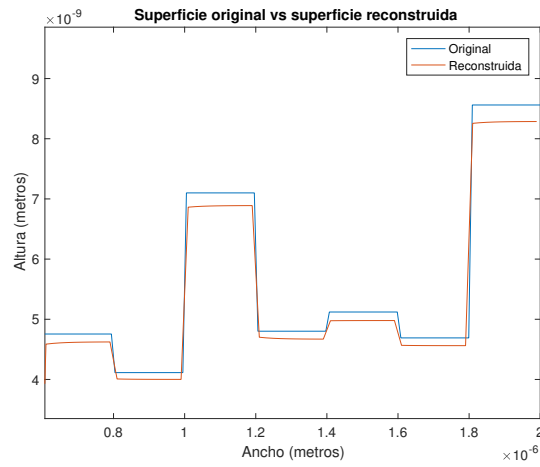
En las figuras 4.12(a), 4.12(b) y 4.12(c) se observa como la reconstrucción (en rojo) es cada vez más parecida, en forma, a la muestra original conforme se va disminuyendo la velocidad de barrido y manteniendo constante la cantidad de pasos por línea (100

pasos por línea)



(a) Velocidad de barrido de $60 \mu\text{m/s}$

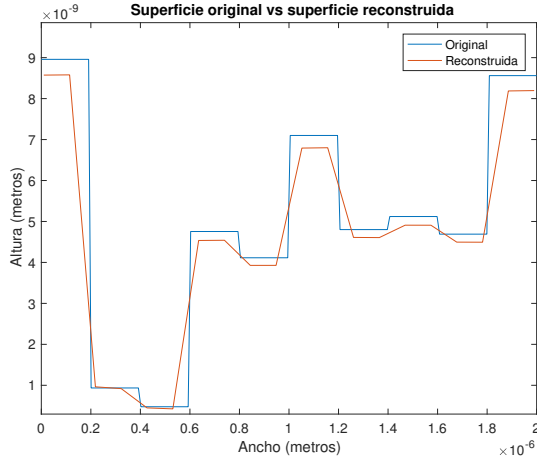
(b) Velocidad de barrido de $40 \mu\text{m/s}$



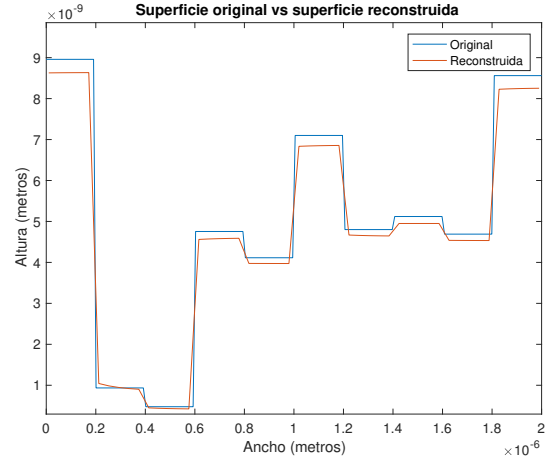
(c) Velocidad de barrido de $20 \mu\text{m/s}$

Figura 4.12: Cambio de la resolución variando la velocidad

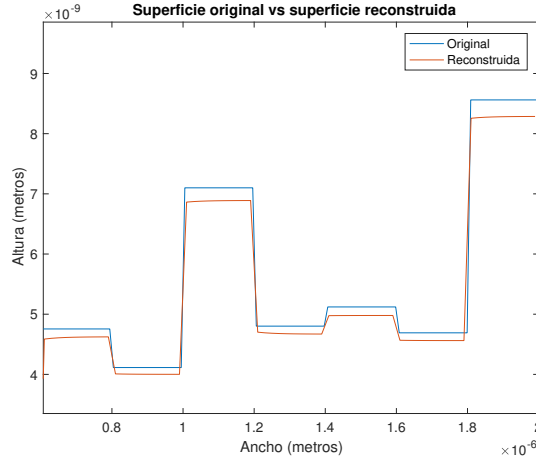
Las figuras 4.13(a), 4.13(b) y 4.13(c) ayudan a visualizar (en rojo) como mejora el detalle de la reconstrucción conforme se van aumentando la cantidad de pasos por línea a una velocidad de barrido de $20 \mu\text{m/s}$.



(a) 20 pasos por línea



(b) 5 pasos por línea



(c) 100 pasos por línea

Figura 4.13: Cambio de la resolución variando la cantidad de pasos por línea

4.8.2. Fases en muestras heterogéneas

En las muestras homogéneas, la curva de fuerza es similar a la curva de la superficie debido a que la diferencia entre un punto y otro está únicamente dado por la altura. En el caso de las muestras heterogéneas, además de la altura, el valor de A también varía, por lo que la curva de fuerza y la señal de salida pueden tomar una forma que puede ser totalmente distinta a la de la superficie de la muestra.

Tomando una superficie con las dimensiones y rugosidad de las anteriores simulaciones y el mismo voladizo de SiO_2 , se muestra en la figura 4.14, como la curva de interacción (normalizada en rojo) cambia su forma cuando la muestra (normalizada

en azul) está fabricada de SiO_2 y plata, donde a pesar de encontrarse a mayor altura y, por lo tanto, más cerca de la punta del voladizo durante el barrido, las fuerzas de interacción en algunas regiones de plata en la muestra (verde) son incluso más débiles que en las de SiO_2 (amarillo).

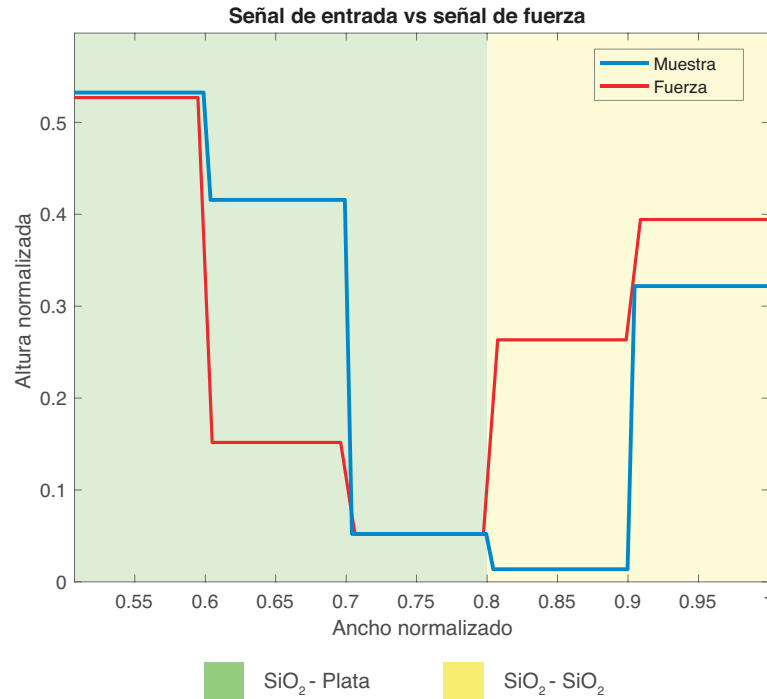


Figura 4.14: Dependencia de la composición química en el cálculo fuerzas de interacción punta-muestra.

Y por lo tanto, al barrer el voladizo, la señal de salida procesada (en negro) se parecerá a la señal de fuerza (señal de entrada) y cuando se compara, normalizada, la geometría de ambas se visualiza que se pierde la forma de la topografía de la muestra (figura 4.15)

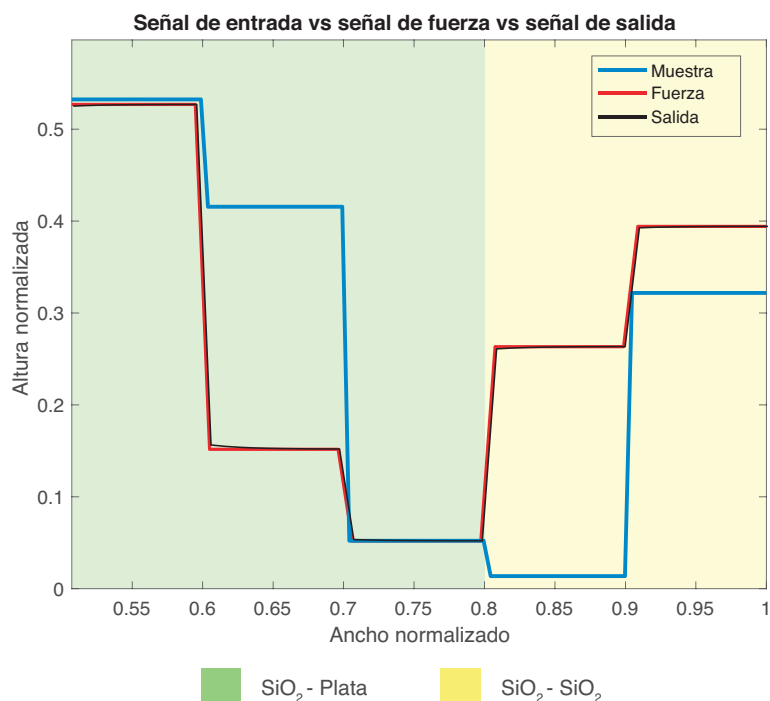


Figura 4.15: Señal de salida en comparación con la superficie de una muestra heterogénea.

Sin embargo, al conocer la composición química de cada región, es decir, el valor de A para cada punto, se puede reconstruir una propuesta de superficie de manera adecuada (figura 4.16) y la superficie vuelve a tomar la forma de la muestra original.

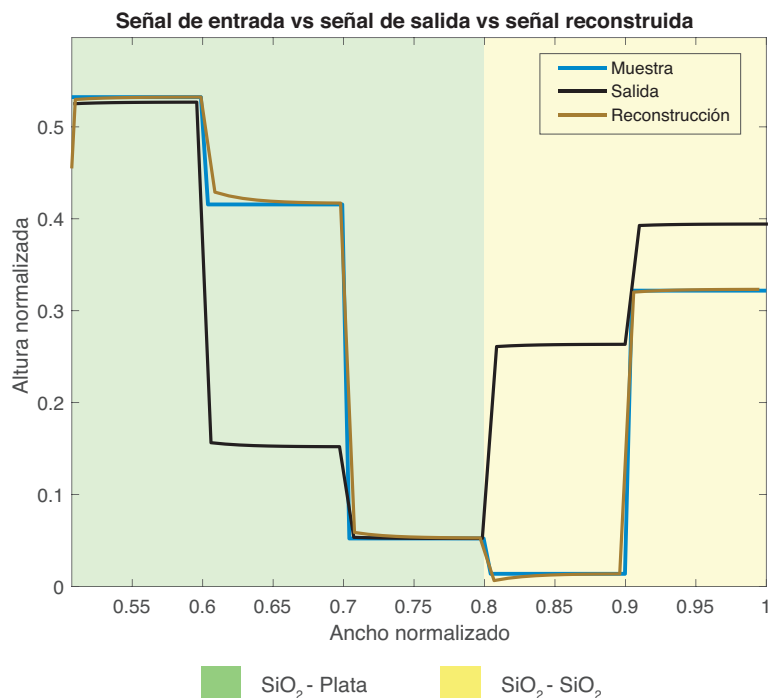


Figura 4.16: Reconstrucción de una muestra heterogénea.

4.9. Datos comparativos

Para analizar en que medida afectan los cambios de los parámetros, se hace una comparación de los datos de la matriz que forma a la superficie de la muestra con la de la superficie reconstruida a través de la correlación, que arroja en porcentaje la similitud entre dos grupos de datos. Pero, debido a que las distribuciones de datos de ambas matrices son distintas, se hace una comparación de cada dato de una matriz con el valor que le correspondería de la otra matriz obtenido a partir de una interpolación lineal de los datos más cercanos. Por ejemplo, si se comparan dos matrices como las que se muestran en la figura 4.17, donde en rojo se muestra la matriz que le da forma a la superficie de la muestra y en azul a la de la superficie reconstruida, se logra apreciar que la mayoría de los puntos de ambas no coinciden, por lo que a través de la interpolación lineal se obtienen los datos necesarios para compararlas.

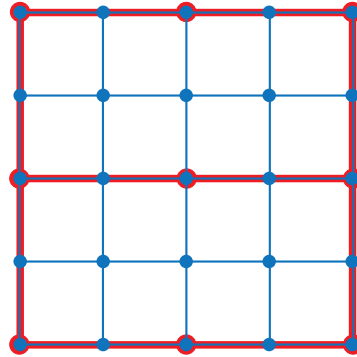


Figura 4.17: Representación de la diferencia en cantidad de datos entre dos matrices a comparar.

En la figura 4.18 se muestran en color amarillo los datos de la matriz de la muestra que se obtuvieron por interpolación

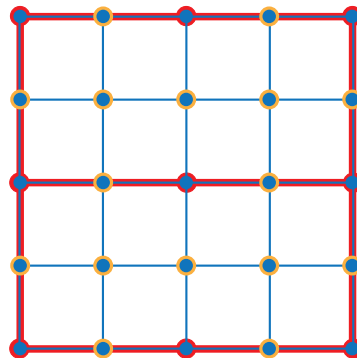


Figura 4.18: Matrices con datos interpolados.

Una vez obtenidos los puntos es posible comparar los datos de ambas matrices.

En el siguiente ejemplo, se analiza una muestra homogénea de SiO_2 de $2\ \mu m$ de ancho y largo y una rugosidad media de $5.22\ nm$. Se barre con un voladizo de SiO_2 con una punta $10\ nm$ de radio en la semiesfera, rigidez de $k = 0.2N/m$, frecuencia de resonancia de $w = 13,000Hz$ y un factor de calidad de $Q = 100$, parámetros suficientes para obtener los valores de masa y coeficiente de amortiguamiento viscoso con las ecuaciones 1.1 y 3.8.

En la tabla 4.1 se muestra como, tras haber ejecutado la simulación, aumenta el porcentaje de similitud entre ambas matrices cuando se aumenta la cantidad de pasos y manteniendo una velocidad establecida por estimaciones de $30\ \mu m/s$ (esta velocidad se establece de esta manera solo para fijar un punto de partida).

Cantidad de pasos	Correlación (%)
5	23.1222
10	77.7909
20	92.5092
40	97.0821
60	98.4747
80	98.7826
100	99.0147

Tabla 4.1: Relación de la cantidad de pasos por línea con la resolución de la superficie reconstruida.

Mostrando una tendencia como la que se muestra en la figura 4.19

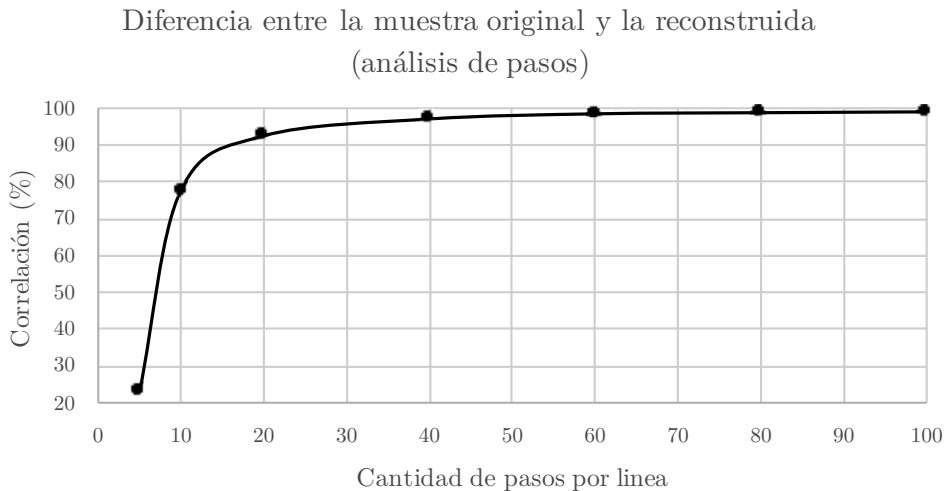


Figura 4.19: Tendencia de la correlación contra la cantidad de pasos por línea.

De acuerdo a esta tendencia, se obtiene que la cantidad de pasos óptima es de 80 pasos por línea, ya que a partir de esta cantidad el aumento en la similitud no es significativa.

También, al variar la velocidad se provoca un cambio en la resolución en la señal de salida como se muestra en la tabla 4.2, donde se consideran los 80 pasos obtenidos en el análisis anterior.

Velocidad de barrido ($\mu m/s$)	Correlación (%)
5	99.026
10	98.8358
30	98.7826
100	98.0532
175	97.711
220	82.34
250	8.533

Tabla 4.2: Relación de la velocidad de barrido con la resolución de la superficie reconstruida.

Su tendencia es como la de la figura 4.20.

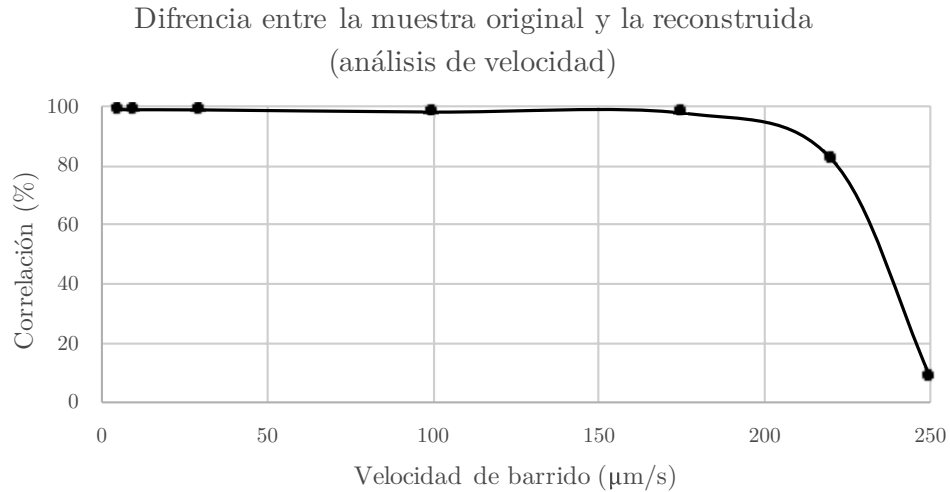


Figura 4.20: Tendencia de la correlación contra la velocidad de barrido.

Donde se visualiza como a partir de los 100 $\mu m/s$ las variaciones en la similitud dejan de ser significativas, quedando como la velocidad óptima.

Entonces se puede establecer que, para una caracterización de alta resolución de esta muestra en particular, se recomienda una velocidad de barrido de máximo 100 $\mu m/s$ a mínimo 80 pasos por línea, obteniendo un tiempo total de caracterización de 2.13 minutos.

4.10. Simulador

4.10.1. Interfaz

Parámetros

La pestaña principal «Parámetros» contiene todos los campos necesarios para definir cada sección de la simulación de acuerdo a las necesidades del usuario, abarcando la mayor cantidad de parámetros involucrados en el modo de operación de no contacto (figura 4.21).

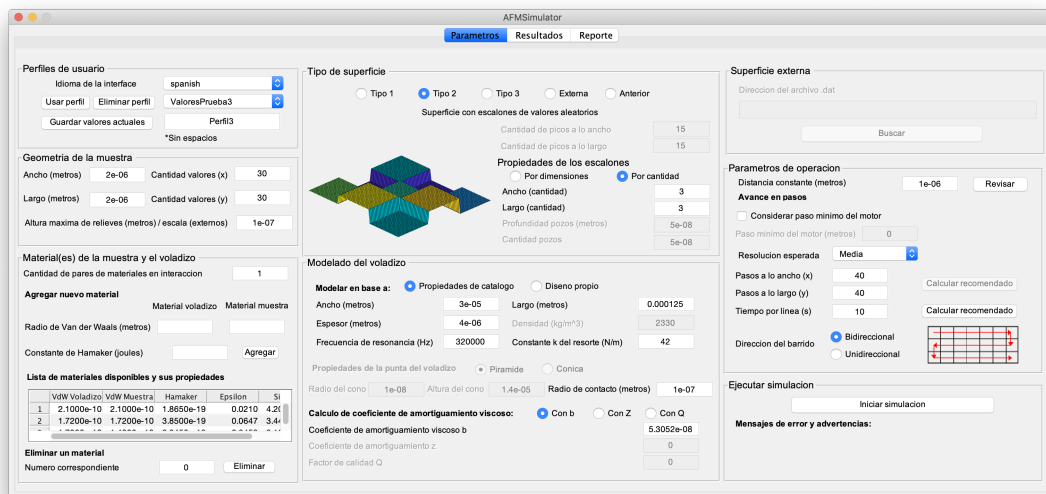


Figura 4.21: Vista general de la pestaña «Parámetros» del simulador.

La superficie se modela a través de dos apartados. En la sección izquierda central, se establecen los parámetros que todas las superficies tienen en común: largo, ancho, altura máxima y la cantidad de datos que las formarán (figura 4.22).

Geometría de la muestra

Ancho (metros) Cantidad valores (x)

Largo (metros) Cantidad valores (y)

Altura maxima de relieves (metros) / escala (externos)

Figura 4.22: Sección del modelado de la geometría de la muestra.

En la sección superior central (figura 4.23) se selecciona el modelo de la superficie que se va a generar. Al seleccionar cada uno de los tipos de superficies, se activan los campos necesarios para llevar a cabo la simulación.

Tipo de superficie

☐ Tipo 1 ☒ Tipo 2 ☐ Tipo 3 ☐ Externa ☐ Anterior

Superficie con escalones de valores aleatorios

Cantidad de picos a lo ancho

Cantidad de picos a lo largo

Propiedades de los escalones

☐ Por dimensiones ☒ Por cantidad

Ancho (cantidad)

Largo (cantidad)

Profundidad pozos (metros)

Cantidad pozos

Figura 4.23: Sección de la selección del tipo de superficie a generar.

En caso de seleccionar la opción de utilizar una superficie modelada de manera externa, se activa la sección superior derecha para buscar el archivo que debe de cumplir con los requerimientos mínimos de estar en formato *.dat* y que sus datos estén separados por espacios (4.24).

Superficie externa

Direccion del archivo .dat

Figura 4.24: Sección para la importación de superficies externas.

El voladizo se modela en la sección central inferior, donde se introducen los paráme-

tros necesarios para la obtención de m , k y b (figura 4.25).

Modelado del voladizo

Modelar en base a: ☒ Propiedades de catalogo ☐ Diseno propio

Ancho (metros) Largo (metros)

Espesor (metros) Densidad (kg/m^3)

Frecuencia de resonancia (Hz) Constante k del resorte (N/m)

Propiedades de la punta del voladizo ☒ Piramide ☐ Conica

Radio del cono Altura del cono Radio de contacto (metros)

Calculo de coeficiente de amortiguamiento viscoso: ☒ Con b ☐ Con Z ☐ Con Q

Coeficiente de amortiguamiento viscoso b

Coeficiente de amortiguamiento z

Factor de calidad Q

Figura 4.25: Sección para el modelado del voladizo.

Para asignarles material a la muestra y el voladizo, se introducen los valores de la constante de interacción de Hamaker y los radios de Van der Waals de cada par de partículas que entran en la interacción (figura 4.26).

Material(es) de la muestra y el voladizo

Cantidad de pares de materiales en interaccion

Agregar nuevo material

	Material voladizo	Material muestra
Radio de Van der Waals (metros)		
Constante de Hamaker (joules)		

Lista de materiales disponibles y sus propiedades

	VdW Voladizo	VdW Muestra	Hamaker	Epsilon	Si
1	2.1000e-10	2.1000e-10	1.8650e-19	0.0210	4.20
2	1.7200e-10	1.7200e-10	3.8500e-19	0.0647	3.4

Eliminar un material

Numero correspondiente

Figura 4.26: Sección de asignación de materiales.

Los parámetros de operación (velocidad de barrido, cantidad de pasos por línea, limitaciones de los motores y dirección de barrido) se introducen en la sección derecha

central (figura 4.27).

Parametros de operacion

Distancia constante (metros)

Avance en pasos

☐ Considerar paso minimo del motor

Paso minimo del motor (metros)

Resolucion esperada

Pasos a lo ancho (x)

Pasos a lo largo (y)

Tiempo por linea (s)

Direccion del barrido ☒ Bidireccional ☐ Unidireccional

Figura 4.27: Sección de introducción de parámetros de operación.

Por último, en la parte inferior derecha se encuentra la sección de ejecución de la simulación y centro de mensajes. En ella se muestran todos los mensajes, advertencias y errores relacionados con la ejecución de la simulación (figura 4.28).

Ejecutar simulacion

Mensajes de error y advertencias:

Figura 4.28: Sección de ejecución de la simulación y centro de mensajes.

Resultados

En la pestaña «Resultados» se visualiza, a través de gráficos, como se fueron procesando los datos antes, durante y después de la simulación. Mostrando la señal de entrada $x(t)$, de salida $y(t)$ y la respuesta al impulso unitario de la función de transferencia $h(t)$, entre otras, desde diferentes vistas y presentaciones para concluir sobre la

idoneidad de los parámetros de operación (figura 4.29).

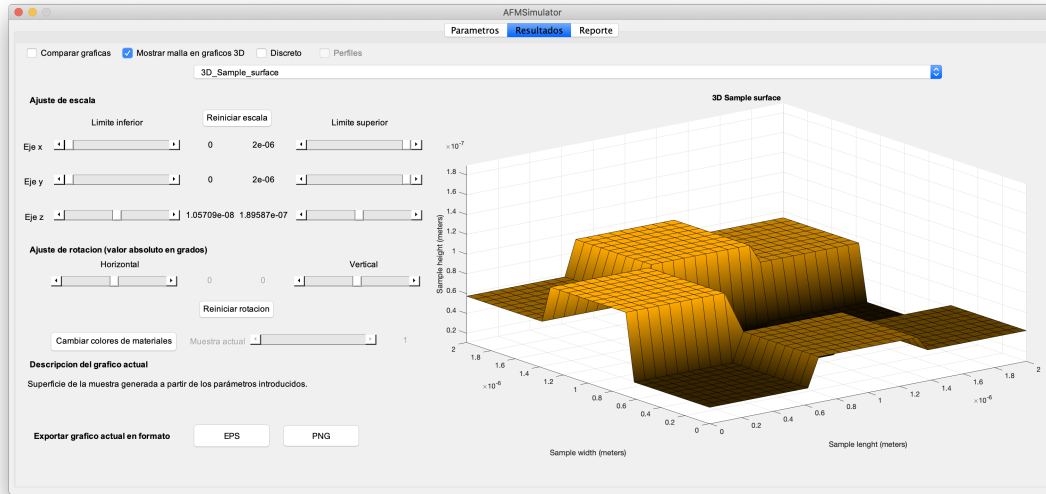


Figura 4.29: Vista general de la pestaña «Resultados» del simulador

En la sección izquierda de la pestaña, se encuentran los controles de escala, rotación, color, entre otros, para una mejor apreciación.

Reporte

Si es necesario analizar a detalle todos los datos que se fueron procesando durante la simulación y que no se expresan de manera gráfica, se muestran en la pestaña «Reporte» del simulador. Mostrando, incluso, datos adicionales como el tiempo de procesamiento de cada una de las etapas de la simulación y los valores utilizados y calculados para que se llevara a cabo (figura 4.30).

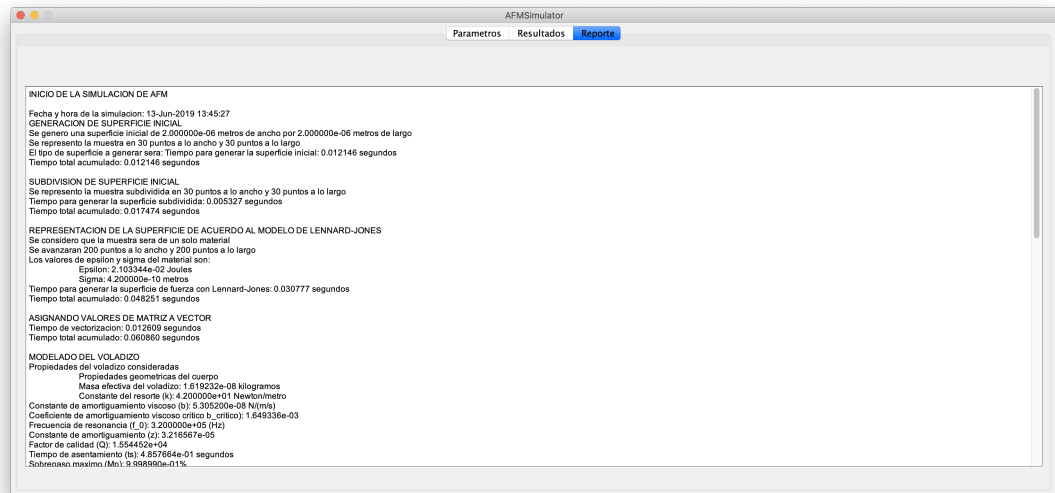


Figura 4.30: Vista general de la pestaña «Reporte» del simulador

5. Conclusiones

- Los parámetros de operación obtenidos del simulador haciendo uso de la comparación de datos (tomando en cuenta la mayor cantidad de variables involucradas en el análisis de microscopía de fuerza atómica), logran tres metas fundamentales: optimizar tiempo evitando prueba y error al analizar una muestra, determinar si el voladizo que se está utilizando tiene los valores de rigidez, amortiguamiento y masa adecuados para obtener la resolución esperada y relacionarse con las variables involucradas y como afectan a la caracterización (para entusiastas y estudiantes).
- Para que los resultados obtenidos sean cercanos a la realidad, los parámetros de entrada también tienen que serlo. Ingresar cualquier dato a base de estimaciones o basado en conocimiento empírico puede afectar de manera considerable a la fiabilidad de los resultados y no se deben de utilizar como referencia para un análisis de microscopía.
- A través de convolución se analiza (a lazo abierto) adecuadamente el comportamiento del sistema dada una señal de entrada, permitiendo visualizar los límites de resolución que se van presentando durante el barrido debido a la variación de los parámetros de operación, propiedades del voladizo y geometría de la muestra.
- La simulación del barrido en muestras heterogéneas permite visualizar correctamente los artefactos debido a su gradiente químico, dejando la posibilidad de implementar un algoritmo que genere una propuesta de la topografía de la muestra basado en el análisis de detección de fases, simulando el modo de operación de contacto intermitente.

- La interfaz del simulador es lo suficientemente clara en su forma de operar, ya que cada campo tiene especificadas las unidades de los parámetros. También cuenta con el centro de advertencias y errores, auxiliar para ejecutar una correcta simulación, indicando la ubicación y el porqué de los errores que no permiten que inicie. Además, se generan los gráficos y el reporte de las diferentes etapas de la simulación, facilitando al usuario el entendimiento de los resultados.
- Una de las principales limitaciones al simular la técnica de la microscopía de fuerza atómica, es la idealización de las variables de entrada, ya que algunos de estos suelen ser muy complicadas de obtener (como la constante de Hamaker, los radios de Van der Waals de las moléculas y el coeficiente de amortiguamiento viscoso) y, cuando esto sucede, es común que se calculen en base a aproximaciones o cálculos idealizados que nos arrojan valores que pueden no estar cerca de la realidad, provocando que el resultado de la simulación tampoco lo esté.
- El simulador está limitado al modo de operación de no contacto. Esto hace que se excluya una gran cantidad de posibles simulaciones que ayudarían en la caracterización de muestras que requieran ser analizadas por el modo de operación de contacto y contacto intermitente. Por lo que es necesario ampliar para la obtención de parámetros de estos modos de operación.
- Uno de los componentes fundamentales del microscopio y del que el simulador carece es el sistema de control para trabajar a través del modo de fuerza constante y obtener señales de salida que representan directamente a la topografía de la muestra y no solo a la deflexión del voladizo como lo hace el simulador a través del modo de operación de distancia constante. Haciendo necesaria su implementación a futuro.
- Resultaría ventajoso ampliar el programa como sistema de control de código abierto de sistemas de medición de fuerzas atómicas. Abriendo a la posibilidad de introducir directamente los parámetros de operación de la simulación al equipo.

Bibliografía

- [1] Galloway Group. Atomic force microscopy: A guide to understanding and using the AFM. *ResearchGate*, 2004.
- [2] Greg Haugstad. *Atomic Force Microscopy: Understanding Basic Modes and Advanced Applications*. John Wiley and Sons, Inc., 2012.
- [3] PRIME Faraday Technology Watch. An introduction to MEMS (micro-electromechanical systems). *PRIME Faraday Partnership*, 2002.
- [4] H. J. Butt; P. Siedle; K. Seifert; K. Fendler; T. Seeger; E. Bamberg; A. L. Weisenhorn; K. Goldie and A. Engel. Scan speed limit in atomic force microscopy. *Journal of Microscopy*, 1992.
- [5] K. Uchino. *Encyclopedia of Materials: Science and Technology*. ELSEVIER, 2011.
- [6] R. V. Gainutdinov and P. A. Arutynov. Artifacts in atomic force microscopy. *Russian Microelectronics*, 2001.
- [7] G. Binnig; H. Rohrer; Ch. Gerber and E. Weibel. Surface studies by scanning tunneling microscopy. *Physical Review Letters*, 1982.
- [8] J. Tersoff and D. R. Hamann. Theory of the scanning tunneling microscope. *Physical Review Letters*, 1985.
- [9] G. Binnig and C. F. Quate. Atomic force microscope. *Physical Review Letters*, 1985.
- [10] B. Bhushman and H. Fuchs. Applied scanning probe methods IV. 2004.

- [11] An introduction to AFM. <https://hansmalab.physics.ucsb.edu/afmhistory.html>. Accessed: 27-05-2019.
- [12] J. Zlatanova; S. M. Lindsay and S. H. Leuba. Single molecule force spectroscopy in biology using the atomic force microscope. 2000.
- [13] Y. Martin; C. C. Williams and H. K. Wickramasinghe. Atomic force microscope-force mapping and profiling on a sub 100-angstroms scale. 1987.
- [14] A. J. Putman; K. O. Van der Werf; B. G. De Grooth; N.F. Van Hulst and J. Greve. Tapping mode atomic force microscopy in liquids. 1989.
- [15] G. E. Fantner, G. Schitter, J. H. Kindt, T. Ivanov, K. Ivanova, R. Patel, N. Holten-Andersen, Jonathan Adams, P. J. Thurner, I. W. Rangelow, and P. K. Hansma. Components for high speed atomic force microscopy. 2006.
- [16] C. T. Gibson, B. L. Weeks, C. Abell, T. Rayment, and S. Myhra. Calibration of afm cantilever spring constants. 2003.
- [17] R. D. Piner, S. Hong, and Chad A. Mirkin. Improved imaging of soft materials with modified afm tips. 1999.
- [18] K. Kimand, S. Kim, T. Kim, W. Kim, and J. Lee. Spray-coated liquid metal reflectors for transparent hydrogel atomic force microscope cantilevers. 2016.
- [19] L. R. Viannie, S. Joshi, G. R. Jayanth, K. Rajanna, and V. Radhakrishna. Afm cantilever with integrated piezoelectric thin film for micro-actuation. 2012.
- [20] Joan Bausells. Piezoresistive cantilevers for nanomechanical sensing. 2015.
- [21] J. Káman and A. Boyár. Investigation of the afm contact-mode force calibration with simulation. 2017.
- [22] AFMech-suite. <https://github.com/marsdeck/AFMech-Suite>, 2018. Accessed: 10-06-2019.

- [23] X. Duan and Y. Long. A fuzzy control strategy for flexible micro-cantilever in afm. 2012.
- [24] A. Delnavaz, N. Jalili, and H. Zohoor. Vibration control of afm tip for nanomanipulation using combined sliding mode techniques. 2007.
- [25] P. Saenz-Gonzalez. Simulation and impedance characterization of piezoelectric microcantilevers. 2015.
- [26] T. Enmei, H. Fujimoto, and Y. Hori. Novel method for high speed force curve measurement considering cantilever dynamics for atomic force microscopy. 2015.
- [27] VEDA. <https://nanohub.org/resources/veda>, 2014. Accessed: 10-06-2019.
- [28] S. Salapaka and M. Dahleh. A model for friction in atomic force microscopy. 2000.
- [29] R. Saeidpourazar and N. Jalili. Microcantilever-based force tracking with applications to high-resolution imaging and nanomanipulation. 2015.
- [30] G. J. Verbiest and M. J. Rost. Resonance frequencies of afm cantilevers in contact with a surface. 2016.
- [31] S. Dastjerdi and M. Abbasi. A vibration analysis of a cracked micro-cantilever in an atomic force microscope by using transfer matrix method. 2019.
- [32] E. A. Obraztsova, D. B. Basmanov, N. A. Barinov, and D. V. Klinov. Carbon nanospikes: Synthesis, characterization and application for high resolution afm. 2019.
- [33] J. Skibinski, J. Rebis, T. Wejrzanowskia, K. Rozniatowskia, K. Pressardb, and K. J. Kurzydlovska. Imaging resolution of afm with probes modified with fib. 2014.
- [34] Y. Wang, S. Wu, L. Xu, and Y. Zeng. A new precise positioning method for piezoelectric scanner of afm. 2019.

- [35] T. D. Gupta, H. Habibullah, H. R. Pota, and J. R. Petersen. Data driven controller design for positioning control of an afm scanner. 2017.
- [36] L. Han and F. Yongchun. Sensorless image based positioning control strategy design for afm systems. 2017.
- [37] J. Guo and Y. Fang. A novel generalized predictive control strategy for afm piezo-scanners. 2017.
- [38] Christian Falconi. Piezoelectric nanotransducers. 2019.
- [39] H. J. Quenzer, U. Dreschsler, A. Sebastian, S. Marauska, B. Wagner, and M. Despont. Fabrication of conducting afm cantilevers with aln-based piezoelectric actuators. 2011.
- [40] R. García and H. Herruzo. The emergence of multifrequency force microscopy. 2012.
- [41] H. Liu, S. Fu, J. Z. Zhu, H. Li, and H. Zhan. Visualization of enzymatic hydrolysis of cellulose using afm phase imaging. 2009.
- [42] Donald C. Craig. *Extensible Hierarchical Object-Oriented Logic Simulation with an Adaptable Graphical User Interface*. Department of Computer Science Memorial University of Newfoundland, 1996.
- [43] Franz J. Giessibl. Advances in atomic force microscopy. *Reviews of Modern Physics*, 2003.
- [44] Rebecca Howland and Lisa Benatar. *A practical guide to Scanning Probe Microscopy*. ThermoMicroscopes, 2000.
- [45] Chenxu Zhu. *Nanofabrication and its application in developing high aspect ratio (HAR) and edge Atomic Force Microscopy (AFM) probes*. University of Waterloo, 2018.
- [46] Phil Russell. AFM probe manufacturing. *Appalachian State University*, 2008.

- [47] Non-contact/tapping mode AFM probes. <https://www.budgetsensors.com/contact-mode-afm-probes>. Accessed: 08-05-2019.
- [48] Contact mode AFM probes. <https://www.budgetsensors.com/contact-mode-afm-probes>. Accessed: 08-05-2019.
- [49] Contact mode. <https://www.nanosensors.com/contact-mode-afm-tips>. Accessed: 08-05-2019.
- [50] AFM probes. <https://www.brukerafmprobes.com/>. Accessed: 08-05-2019.
- [51] Martín Reyes Melo. Autoafinidad de superficies de fractura en materiales plásticos. *Universidad Autónoma de Nuevo León*, 2001.
- [52] Georg Schitter; Karl J. Astrom; Barry E. DeMartini; Philipp J. Thurner; Kimberly L. Turner and Paul K. Hans. Design and modeling of a high-speed afm-scanner. *IEEE Transactions on Control Systems Technology*, 2007.
- [53] M.V. Salapaka A. Daniele, S. Salapaka and M. Dahleh. Piezoelectric scanners for atomic force microscopes: Design of lateral sensors, identification and control. *Proceedings of the American Control Conference*, 1999.
- [54] Shuai Yuan; Zhidong Wang; Ning Xi; Yuechao Wang and Lianqing Liu. AFM tip position control in situ for effective nanomanipulation. *IEEE/ASME Transactions on Mechatronics*, 2018.
- [55] L.N.Sun W.Dong and Z.J.Du. Design of a precision compliant parallel positioner driven by dual piezoelectric actuators. *Sensors and Actuators A: Physical*, 2007.
- [56] David P. Allison; Ninell Pollas Mortensen; Claretta Jackson Sullivan and Mitchel J. Doktycz. Atomic force microscopy of biological samples. *Wiley interdisciplinary reviews. Nanomedicine and Nanobiotechnology*, 2010.
- [57] F.Golek; P. Mazur; Z Ryszka and S.Zuber. AFM image artifacts. *ELSEVIER*, 2014.

- [58] R. Hernandez. *Introducción a los sistemas de control: Conceptos, aplicaciones y simulación con MATLAB*. PEARSON, 2010.
- [59] Q Zou; KK Leang; E Sadoun; MJ Reed and S Devasia. Control issues in high-speed AFM for biological applications: Collagen imaging example. *Asian J Control*, 2004.
- [60] Faouzi Lakrad. Invariant slow manifolds of an atomic force microscope system under the effects of lennard-jones forces and a slow harmonic base motion. 2015.
- [61] S. M. Lin, C. T. Liauh, W. R. Wang, and S. Ho. Analytical solutions of the first three frequency shifts of a non-uniform probe subjected to the lennard-jones force. 2006.
- [62] Vibración de una molécula diatómica. <http://www.sc.ehu.es/sbweb/fisica3/oscilaciones/diatomica/diatomica.html>, 2016. Accessed: 06-06-2019.
- [63] S. I. Zanette, A. O. Caride, V. B. Nunes, G. L. Klimchitskaya, F. L. Freire Jr., and R. Prioli. Theoretical and experimental investigation of the force-distance relation for an atomic force microscope with a pyramidal tip. 2000.
- [64] P. Tolias. Lifshitz calculations of constants for fusion relevant materials. *ELSEVIER*, 2018.
- [65] Fabio L. Leite; Carolina C. Bueno; Alessandra L. Da Róz; Ervino C. Ziemath and Osvaldo N. Oliveira Jr. Theoretical models for surface forces and adhesion and their measurement using atomic force microscopy. *International Journal of Molecular Sciences*, 2012.
- [66] M. A. Poggu, A. W. Colton, and L. A. Bottomley. A method for calculating the spring constant of atomic force microscopy cantilevers with a nonrectangular cross section. 2005.
- [67] W. M. Siebert. *Circuits, Signals, and Systems*. The MIT Press, 1985.
- [68] Mario E. Salgado; Juan I. Yuz and Ricardo A. Rojas. *Análisis de sistemas lineales*. Universidad Técnica Federico Santa María, 2014.

- [69] Josep Canet. Correction of the tip convolution effects in the imaging of nanostructures studied through scanning force microscopy. *Nanotechnology*, 2014.
- [70] Paul West and Natalia Starostina. A guide to AFM artifacts. *Pacific Nanotechnology*.
- [71] S. Belikov and S. Mogonov. Tip-sample interaction force modeling for afm simulation, control design, and material property measurement. *American Control Conference*, 2011.
- [72] Toshio Ando. High-speed atomic force microscopy and its future prospects. 2017.
- [73] A. F. García. Analytical solutions of the first three frequency shifts of afmnon-uniform probe subjected to the lennard–jones force. 2006.