

基于随机方法的 AFM 探针位置最优估算研究^{*}

袁 帅^{1,2}, 尧 晓¹, 栾方军¹, 郭 耸¹, 冯吉远¹

(1. 沈阳建筑大学信息与控制工程学院 沈阳 110168; 2. 中国科学院沈阳自动化研究所 沈阳 110016)

摘 要: 由于受到驱动器 PZT (PbZrTiO₃) 非线性、系统温漂与其他不确定因素的影响, 原子力显微镜 (AFM) 探针在任务空间的位置存在不确定性。这严重影响了 AFM 探针观测与操作的效率, 如何减小探针位置的不确定性, 实现 AFM 探针的精确定位成为亟待解决的问题。针对此问题, 提出用概率分布的方式描述探针位置的不确定性, 通过建立探针运动模型, 结合基于局部扫描的观测模型, 采用 Kalman 滤波对探针位置进行最优估算。针对算法的实现, 设计了模型参数标定方案。通过仿真和实验的结果验证了算法的有效性与可行性, 实现了探针在任务空间中的精确定位, 提高了纳米操作效率。

关键词: 探针精确定位; 运动模型; 局部扫描; Kalman 滤波; 参数标定

中图分类号: TP24 TH89 **文献标识码:** A **国家标准学科分类代码:** 510.80

Optimal position estimation of AFM tip based on stochastic approach

Yuan Shuai^{1,2}, Yao Xiao¹, Luan Fangjun¹, Guo Song¹, Feng Jiyuan¹

(1. School of information and control engineering, Shenyang Jianzhu University, Shenyang 110168, China;

2. Shenyang Institute of Automation, Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110016, China)

Abstract: Due to nonlinearity, system temperature drift and other uncertainties of PZT (PbZrTiO₃), there exists uncertainty for the position of AFM (Atomic Force Microscopy) tip in the task space. It seriously affects the observation and operation efficiency of AFM tip. Thus, to reduce the uncertainty of tip position, and achieve precise positioning becomes an urgent issue to be solved. Firstly, this work represents the uncertainties of tip position in the task space by using the probability distribution. Then, tip motion model is established, and local scan based observation model is combined to estimate optimal tip position by using the Kalman filter. In addition, a model parameter calibration scheme is designed to implement the proposed method. The validity and feasibility of the algorithm are verified by the simulation and experimental results. AFM tip precise positioning can be realized in the task space, and the efficiency of nanomanipulation can be improved.

Keywords: tip precise positioning; motion model; local scan; Kalman filtering; parameter calibration

0 引 言

纳米科技是在纳米尺度上使用单个原子、分子制造功能器件或系统的科学技术。扫描隧道显微镜 (scanning tunneling microscopy, STM) 及原子力显微镜 (atomic force microscopy, AFM) 的出现对纳米科技发展产生重要的推动作用^[1]。其中 AFM 由于其高分辨率、高运动精度、作业方式可重复、机械力式操作方式、任意环境可适用等优

点而受到研究者的广泛关注, 成为目前最有潜力的纳米操作工具^[2-3]。基于 AFM 的纳米操作是依靠探针与被操作物体间的相互作用而实现的, 因而探针相对于被操作物体的精确位置控制是其成功操作的前提^[4-5]。然而实际操作中, 由于探针驱动器压电陶瓷非线性、系统温漂等不确定性因素的影响, 探针在任务空间中的位置是分布在一个区域内, 而且该不确定性分布区域将随着探针的移动而逐渐增大, 因此很难将探针精确定位在感兴趣的目标点上^[6]。在使用 AFM 进行纳米操作时, 往往需要花

收稿日期: 2017-04 Received Date: 2017-04

^{*} 基金项目: 中国国家自然科学基金青年基金 (61305125)、沈阳建筑大学学科内容教育工程 (XKHY2-66)、学校自然科学基金 (2014068, 2017028)、国家博士后基金 (2013M530955, 2014T70265) 项目资助

费大量的时间对其位置进行手工调节,这严重阻碍了基于 AFM 的有效纳米操作。AFM 探针的精确定位成为了纳米操作技术发展中亟待解决的重要问题。

为了提高探针定位的精度,针对压电陶瓷控制中存在的误差,目前主要采用压电陶瓷管压电陶瓷的模型补偿^[7]和基于位置传感器的闭环控制来降低误差。模型补偿下的扫描图像分辨率高,系统实现成本低,但其性能取决于参数的准确程度,而实际上模型的参数不容易被精确标定,且环境条件的变化也会对参数有一定的影响,因此很难实现探针位置的精确控制。闭环控制固然能得到较好的补偿效果,能提高探针相对于压电陶瓷管中心轴线的定位精度,但难以消除系统温漂^[8-9]以及相对随机漂移的影响,且其在增加反馈回路的同时也增加了系统噪音,不仅难以实现探针相对于被操作物体的精确定位^[10-11],也使得系统实现的成本大幅提高。针对由温度与湿度变化等因素引起温漂效应,传统的抑制方法是对 AFM 运行环境的温度和湿度进行严格控制,让其保持在同一条件下让 AFM 开机扫描数个小时。但是用这种方法的效率不高,因此有研究者提出使用基于模型的补偿方法,如 Kalman 滤波和神经网络^[12],这些方法的效果同样取决于模型参数的精确性,但即使通过实验也不容易获得精确的参数,因此很难精确地补偿温漂的偏移。

本研究针对上述问题,提出一种基于随机方法的路标定位法,以概率分布的方式描述探针位置在任务空间的不确定性,通过 PI 模型、蠕变模型和温漂模型建立探针的运动模型,并将操作环境地图中的特征物作为路标开展基于局部扫描的快速路标观测,根据局部扫描的观测模型与所建立的概率运动模型,使用 Kalman 滤波对探针的位置进行最优估算,实现探针在操作过程中的高精度、高分辨率和低成本的实时定位。针对算法的实现,设计了具有统计性的实验方案对模型参数进行标定。最后通过仿真和实验结果验证了该算法可以有效的减小探针位置的不确定性,提高纳米操作效率。

1 AFM 纳米操作系统中探针定位算法

1.1 基于随机方法的路标定位策略

在任务空间坐标系中探针位置的不确定性会随着探针运动和时间变化而增加,为了提高位置精度,定位过程中探针将以间歇地方式观测路标(纳米颗粒)的中心。类似于宏观机器人通过观测自身与墙面、墙角和柱子空间关系的定位方法^[13-15],探针在样品表面中将通过基于局部扫描的方法观测自身和路标中心位置的空间关系进行位置估算。图 1(a)所示为 AFM 探针在 $t=0$ 时刻的状态,在 18 min 后,受到系统温漂的影响,纳米颗粒从 P_1

漂移到 P'_1 ,而探针相对于样品表面将向下和向右移动。为了确定探针当前的位置,本算法将控制探针沿着 l_k 水平方向和 l_v 垂直方向扫描纳米颗粒,从而得到纳米颗粒中心位置 P'_1 ,如图 1(b)所示。同时探针也获得当前位置 x_{k+i} 和纳米颗粒中心的相对距离。根据 P'_1 在任务空间的位置,同时结合驱动探针运动的输入控制量,使用 Kalman 滤波即可估算出探针的当前位置 x_{k+i} 。

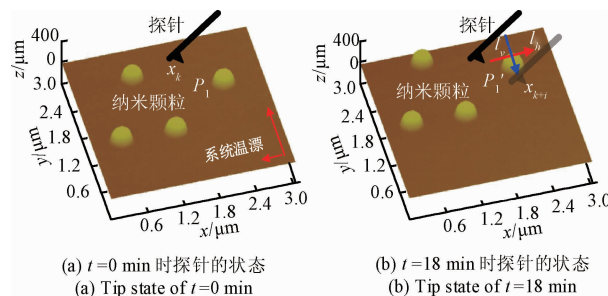


图 1 基于随机方法的探针定位策略

Fig. 1 Tip location strategy based on stochastic method

1.2 基于 AFM 的纳米操作系统控制框图

本文提出的基于随机方法的路标定位策略是一种建立在新技术框架下的反馈控制方法,系统控制流程如图 2 所示。

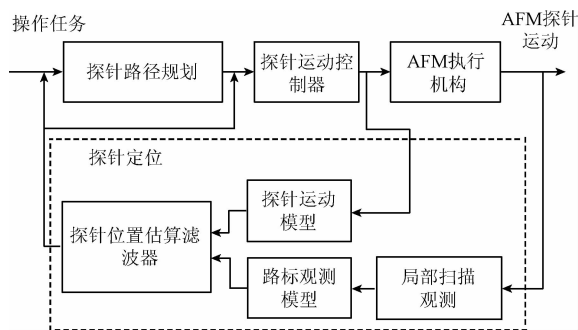


图 2 基于随机方法的路标定位控制流程

Fig. 2 Control flowchart of landmark positioning based on stochastic method

该方法与通常的反馈控制系统相比,有两点不同。

1) 探针定位反馈回路的数据来源分为两部分

探针运动模型的位置估算和基于路标观测的位置估算。探针运动模型可以实时估算探针的位置,而其误差会在反馈回路内随着时间和探针运动逐渐增加。在通过基于路标观测的 Kalman 滤波最优估算补偿后,探针位置的不确定性分布可以得到降低。

2) 探针运动轨迹规划模块是探针定位反馈回路中的一部分

探针运动轨迹规划模块功能是将探针位置的不确定

性控制在允许范围之内,以实现 AFM 有效的纳米操作。由于路标观测是依靠探针运动完成的,因此探针在移动到目标位置之前的路标观测需要探针运动轨迹规划模块进行路径规划。

1.3 基于 AFM 的探针位置状态定义

AFM 探针在任务空间中 $k+1$ 时刻的位置状态量 x_{k+1} 由下面探针运动的概率运动模型表示,其中包含探针前一时刻的位置状态 x_k 与控制量 u_k 。

$$x_{k+1} = g(x_k, u_k) + w_{k+1} \quad w_{k+1} \sim N(0, R_{k+1}) \quad (1)$$

式中: $g(\cdot)$ 是状态转移函数,类似于宏观移动机器人,它是 x_k 和 u_k 的线性叠加结果。 w_{k+1} 是探针位置的扰动变量, u_k 是压电陶瓷非线性滞环模型补偿后的控制量, R_{k+1} 是二维协方差矩阵。另外,公式中添加压电陶瓷的蠕变距离 d_k 和系统温漂 $v_k \cdot \Delta t$ 来校正探针运动模型。

$$g(x_k, u_k) = x_k + u_k + d_k + v_k \cdot \Delta t \quad (2)$$

$$w_{k+1} = w_{k,h} + w_{k,c} + w_{k,d} \quad (3)$$

式中: v_k 是温漂速度, Δt 是探针从 $x_k \sim x_{k+1}$ 的运动时间间隔。因为探针在压电陶瓷管中心轴线周围的小范围内执行扫描和操作,在输入电压按照一定速率变化的条件下, v_k , d_k 和 u_k 可以被认为随着时间变化相互独立,因此探针位置扰动 w_{k+1} 被认为是对应三部分因素 u_k 、 d_k 与 v_k 的扰动随机变量 $w_{k,h}$ 、 $w_{k,c}$ 与 $w_{k,d}$ 的线性叠加结果。这些扰动因素服从高斯分布,相应参数在后面部分中通过实验进行标定。

2 基于 Kalman 的路标观测模型

2.1 路标的定义

AFM 在进行纳米操作之前,先对操作区域扫描一幅先验地图,再将先验地图映射到任务空间坐标系中。在先验地图中,选择那些具有特征形貌的纳米颗粒、纳米棒作为观测路标,并将这些路标的位置信息记录在 M 集合中,如式(4)所示, m 代表路标的位置, N 是路标的总数。

$$M_N = \{m_1, m_2, m_3, \dots, m_N\} \quad (4)$$

$$m_j = m_{j,xy} + v_{\text{map}} \quad v_{\text{map}} \sim N(0, Q_{\text{map}})$$

式中: $m_{j,xy}$ 是作为第 j 个路标的纳米颗粒在任务空间坐标系中的位置。 v_{map} 是纳米颗粒中心的误差随机变量,服从均值为 0、协方差为 Q_{map} 的高斯误差分布。

2.2 路标的观测

在观测路标时,针对纳米颗粒可以进行两次不同方向且相互垂直的快速扫描观测,从而更新探针位置的分布。一般情况下在观测路标时,两次局部扫描的方向与图像坐标系的水平方向和垂直方向相同,如图 3(a) 所示,这样可以简化运动模型的设置。

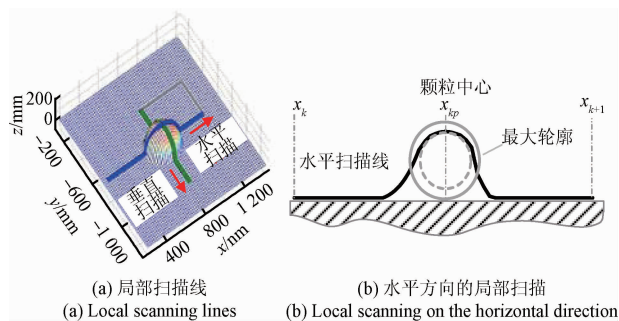


图 3 基于水平方向局部扫描的探针位置更新

Fig. 3 Tip position update based on local scanning on the horizontal direction

图 3(b) 所示为探针定位在水平方向基于局部扫描的路标观测过程。在纳米环境下,不同于宏观机器人在某一位置上使用位置传感器的检测方式,探针需要基于局部扫描的方式从当前位置 x_k 运动到下一时刻位置 x_{k+1} 的轨迹上得到路标位置 x_{kp} 的观测值 z_{kp} , 定义如下:

$$z_{kp} = h(x_k, x_{k+1}, m_j) + v_{z,kp} \quad v_{z,kp} \sim N(0, Q_{z,kp}) \quad (5)$$

式中: $h(\cdot, \cdot)$ 是观测函数, $v_{z,kp}$ 是观测中存在的误差随机变量。不失一般性,假定探针在每一次局部扫描中只有一个观测值,即只扫描到一个路标,然后可得到一系列观测值的集合:

$$Z_T = \{z_1, z_2, \dots, z_T\} \quad (6)$$

2.3 针对水平观测路标过程的建模分析

本文只分析水平方向的观测过程,垂直方向的观测过程可做类似处理。

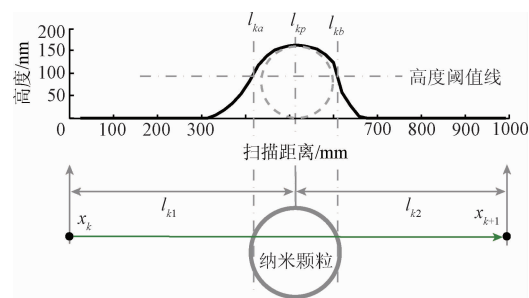


图 4 在水平方向上扫描路标的观测线

Fig. 4 Observation scanning line on the horizontal direction

在观测过程中,如图 4 所示。有两个特点:1) 首先最优估算探针在纳米颗粒中心 x_{kp} 的位置分布,然后根据运动模型估算探针在 x_{k+1} 的位置分布;2) 基于 Kalman 滤波器最优估算探针在纳米颗粒中心 x_{kp} 时的位置分布。

在一次局部扫描观测过程中,探针在 x_{kp} 估算位置的公式如下。

1) 状态模型

$$\bar{x}(kp | k) = x_k + l_{kl}^* \frac{\mathbf{x}_{k,kp}^*}{\|\mathbf{x}_{k,kp}^*\|} + w_{kp} \quad w_{kp} \sim N(0, R_{kp}) \quad (7)$$

式中: l_{kl}^* 是探针从 x_k 到 x_{kp} 的扫描线长度的随机变量, l_{kl}^* 是 l_{kl} 的均值。 $\mathbf{x}_{k,kp}$ 是探针从 x_k 到 x_{kp} 的随机矢量, $\|\mathbf{x}_{k,kp}^*\|$ 是随机矢量均值的模, $\mathbf{x}_{k,kp}^* / \|\mathbf{x}_{k,kp}^*\|$ 是任务空间中局部扫描方向的单位矢量。 w_{kp} 是误差扰动随机变量, 它是探针在 x_k 的扰动 w_k 与探针从 x_k 到 x_{kp} 的扰动 w_{kl} 的线性叠加。

为了得到纳米颗粒中心 x_{kp} 的精确位置, 先在扫描坐标系中计算 l_{kl} , 该值由扫描线与高度阈值线的两个交点 l_{ka} 和 l_{kb} 的中点计算得到。 然后根据扫描线起始点 x_k 在任务空间坐标系中的位置将 x_{kp} 映射到任务空间坐标系中。 一般来说, 路标纳米颗粒的形状为球形或近似于球形, 通过计算 l_{ka} 和 l_{kb} 两个交点之间的中点确定纳米颗粒中心的方法比直接寻找扫描线中的最高点作为路标中心要更稳定, 因为后者对于在最高点附近存在误差的情况缺乏鲁棒性的结果。

2) 观测模型

既然在 $k+1$ 时刻的路标观测是对探针在 x_{kp} 的位置观测, 则观测模型为:

$$z_{kp} = h(x_{kp}, m_j) + v_{z,kp} \quad v_{z,kp} \sim N(0, Q_{z,kp}) \quad (8)$$

为了使用 Kalman 滤波进行估算, 观察值可根据状态值进行推断:

$$h(x_{kp}, m_j) = x(kp | k) \quad (9)$$

式中: z_{kp} 是 x_{kp} 的观测值, $h(x_{kp}, m_j)$ 是观测函数, $v_{z,kp}$ 是观测中存在的误差随机变量。

由于基于局部扫描的路标观测中的不确定性来源于 3 个部分: 路标位置 m_j 的误差 v_{map} ; 快速扫描线扫描纳米颗粒的不同位置引起的误差 $v_{z,kp}$; 快速扫描线方向的偏移引起的误差 $v_{z,\theta}$ 。 这样就得到路标观测误差:

$$v_{z,kp} = v_{map} + v_{z,kp} + v_{z,\theta} \quad (10)$$

3) 基于 Kalman 滤波的最优估算

在 x_{kp} 位置上基于探针运动模型和观测模型, 使用 Kalman 滤波进行位置最优估算。 假设探针运动输入控制量为 $u(k)$, 在 x_{kp} 位置上由运动模型得到的预测值为:

$$\hat{x}(kp | k) = \mathbf{g}(\hat{x}(k | k), u(k))$$

$$\mathbf{P}(kp | k) = \nabla \mathbf{g} \mathbf{P}(k | k) \nabla \mathbf{g}^T + \mathbf{R}(kp) \quad (11)$$

式中: $\mathbf{P}$ 是探针在 x_{kp} 位置状态的协方差。

探针在 x_{kp} 位置的观测值和残差计算如下:

$$\hat{z}_i(kp) = h(\hat{x}(kp | k), m_j) \quad i = 1, \dots, N$$

$$v_{ij}(kp) = [z_j(kp) - \hat{z}_i(kp)] = [z_j(kp) - h(\hat{x}(kp | k), m_j)] \quad (12)$$

$$\mathbf{S}_{ij}(kp) = E[\mathbf{v}_{ij}(kp) \mathbf{v}_{ij}^T(kp)] =$$

$$\nabla \mathbf{h} \mathbf{P}(kp | k) \nabla \mathbf{h}^T + \mathbf{Q}_j(kp) \quad (13)$$

式中: $\mathbf{S}$ 是局部扫描观测路标后的协方差矩阵。 通过计算马氏距离: $\mathbf{v}_{ij}^T(kp) \mathbf{S}_{ij}^{-1}(kp) \mathbf{v}_{ij}(kp) \leq g^2$, 设定一个阈值 g 执行路标的实时观测。 在 x_{kp} 位置的最优估计:

$$\mathbf{W}(kp) = \mathbf{P}(kp | k) \nabla \mathbf{h}^T \mathbf{S}_{ij}^{-1}(kp)$$

$$\hat{x}(kp | kp) = \hat{x}(kp | k) + \mathbf{W}(kp) \mathbf{v}(kp)$$

$$\mathbf{P}(kp | kp) = \mathbf{P}(kp | k) - \mathbf{W}(kp) \mathbf{S}(kp) \mathbf{W}^T(kp) \quad (14)$$

基于 Kalman 滤波在 x_{kp} 位置进行最优估算后, 根据运动模型, 在 x_{k+1} 的计算如下:

$$x_{k+1} = x_{kp} + u_{kp} \quad (15)$$

$$\mathbf{P}(x_{k+1}) = \mathbf{P}(x_{kp}) + \mathbf{R}_{k+1} \quad (16)$$

在包含水平和垂直的路标观测中, 探针的运动变化如图 5 所示, 从 x_k 到 x_{k+4} 完成一次对位置的完整观测。

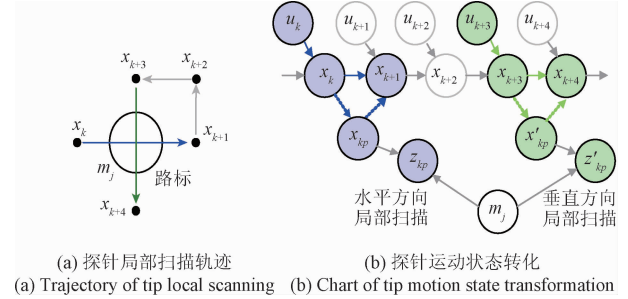


图 5 基于路标观测的探针定位状态

Fig. 5 Tip positioning state graphics based on local scanning

3 探针运动模型的建立

在 AFM 纳米操作中, 控制探针运动的压电陶瓷输入电压通过非线性补偿后包含 3 个部分: PI 滞环补偿模型、蠕变模型和温漂补偿模型。

1) PI 模型

针对压电陶瓷控制器的非线性滞环问题, PI 模型由于其原理简单, 逆模型容易求解而广泛应用于压电陶瓷驱动的前馈控制器中。 PI 模型是由基本迟滞算子的叠加而成, 详见参考文献[16]。

2) 蠕变模型

压电陶瓷的输入控制电压按照采样步长逐步变化, 压电陶瓷在某一时刻的位移不仅与当前的输入控制电压有关系, 而且与输入控制电压的历史变化有关系。 当输入控制电压保持在某一个值没有变化时, 压电陶瓷的位移会逐渐增加一段时间后达到稳定值。 这一变化过程称为蠕变过程。 针对压电陶瓷蠕变的变化过程, 建立蠕变模型, 提高压电陶瓷驱动探针定位的精度。 蠕变模型由一阶微分算子的叠加结果加上输入电压乘一个比例系数组合而成, 详见参考文献[17]。

3) 温漂模型

系统温漂引起的偏移主要取决于温度的变化、系统的机械结构和系统各部件的热膨胀系数等因素。温漂能引起连续扫描图像如图6(a)和(b)中纳米颗粒 P_1 和 P_2 之间的间距变化。这些连续成像是Frame up模式和Frame down模式交替扫描的情况下获得。在Frame up模式下的扫描图像过程中,纳米颗粒 P_2 先被成像, P_1 在成像之前将受到温漂的作用向远离 P_2 的方向漂移,使得二者之间的垂直间距 d_{u-y} 大于真实的距离。然而在Frame down模式下的扫描图像过程中,纳米颗粒 P_1 先被成像, P_2 在成像之前将向靠近 P_2 的方向漂移,使得二者之间的垂直间距 d_{d-y} 小于真实的距离。如图6(c)示意图所示,根据纳米颗粒在不同扫描模式下的时间间隔,在垂直方向的温漂速度 $v_{\text{drift-y}}$ 计算如下(水平方向温漂速度的计算同理):

$$v_{\text{drift-y}} = \frac{d_{u-y} - d_{d-y}}{T_u + T_d} \quad (17)$$

式中: T_u 为Frame up模式下的扫描时间间隔, T_d 为Frame down模式下的扫描时间间隔。

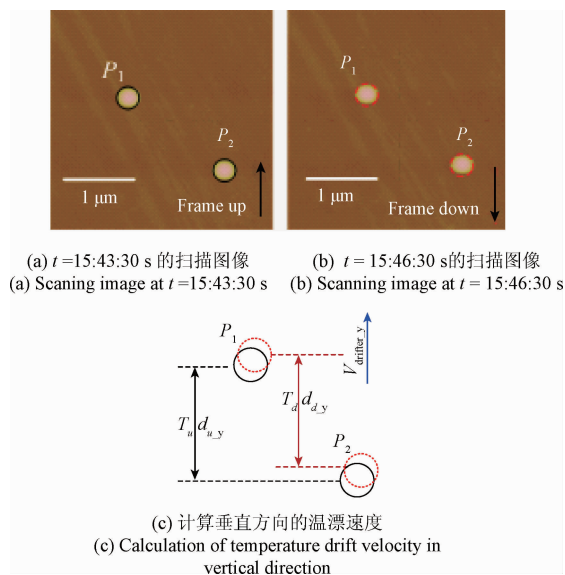


图6 系统温漂估算方法

Fig. 6 System temperature drift estimation

4 模型参数标定

探针运动模型和路标观测模型的参数是采用统计实验方式完成标定,之后会通过探针定位的仿真和实验进行算法的验证。

4.1 探针运动模型的参数标定

运动模型包含了PI模型、蠕变模型和温漂模型。

1) PI模型的参数标定

运动模型中的PI模型用最小二乘法拟合压电陶瓷

滞环的采样点后分别在水平和垂直方向对模型参数进行标定。本文介绍垂直方向的标定过程,水平方向的同理。

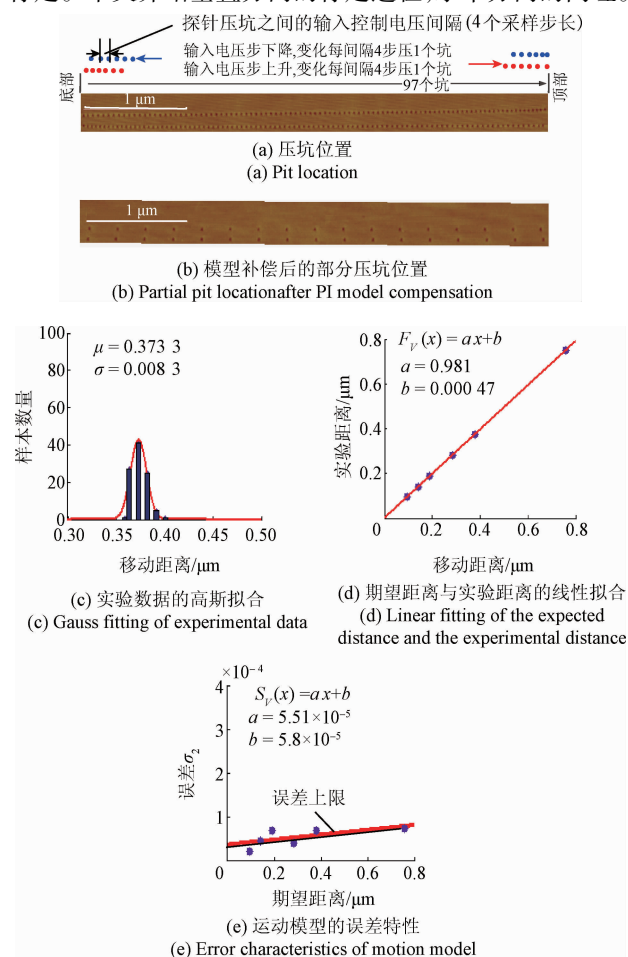


图7 垂直方向上PI模型的参数标定

Fig. 7 Parameters calibration of PI model on the vertical direction

压电陶瓷在垂直方向上的滞环采样点将通过图7(a)中探针在CD表面上压坑的位置获得。获得滞环采样点后,使用最小二乘法对PI参数进行标定,然后得到逆模型补偿压电陶瓷的驱动控制电压。压电陶瓷驱动在采用PI模型补偿后,探针运动的模型误差将随着探针运动距离的增加而增大。PI模型误差分析方法是针对探针运动标定范围内的6组期望距离(一个基本步长的8、12、16、24、32、64整数倍)的运动误差进行实验标定,然后统计压电陶瓷在整个标定范围内的模型运动误差。

每组期望距离的误差统计方法是探针在标定范围内,沿着 y 方向在顶部(上界)和底部(下界)之间反复运动多遍,探针在运动中每间隔该期望距离压一次坑,通过测量相邻坑的间距获得该期望距离的实验结果,对这些实验结果进行统计后得到探针运动模型在该组期望距离上的误差统计结果。如此获得探针标定范围内6组离散

期望距离的误差结果后,进一步统计得到探针在连续运动时的模型误差。图 7(b)所示为一组期望距离(期望距离为 $0.381\ \mu\text{m}$)的探针压坑实验图像。图 7(c)是对图 7(b)中的实验数据采用高斯方法进行拟合。图 7(d)直线是 6 组期望距离与相应实验统计均值的线性拟合结果。图 7(e)是探针运动距离与误差关系的统计结果,可以看出误差随着期望距离的增加而增大。

2) 蠕变模型的参数标定

蠕变模型的参数采用与 PI 模型类似的方法进行标定,这里不再详述。图 8 所示为探针在水平方向建立蠕变模型,并进行误差分析的结果(垂直方向同理)。蠕变模型误差分析方法是针对压电陶瓷蠕变期间在各个等间隔采样时刻的误差进行实验标定,然后统计压电陶瓷在蠕变过程中的模型运动误差。该实验一共做了 20 组,对实验结果拟合后得到蠕变型曲线,如图 8(a)所示。然后在每个采样时刻上对这 20 组实验数据进行统计拟合,如图 8(b)所示(采样时刻 $t=3.83\ \text{s}$),结果满足高斯分布,并且计算高斯分布均值和模型期望值的差值。对不同采样时刻的差值进行统计,得出该差值趋向于 0,如图 8(c)所示。同时对不同采样时刻的误差分布进行统计,如图 8(d)所示该误差随时间增加而线性增大。

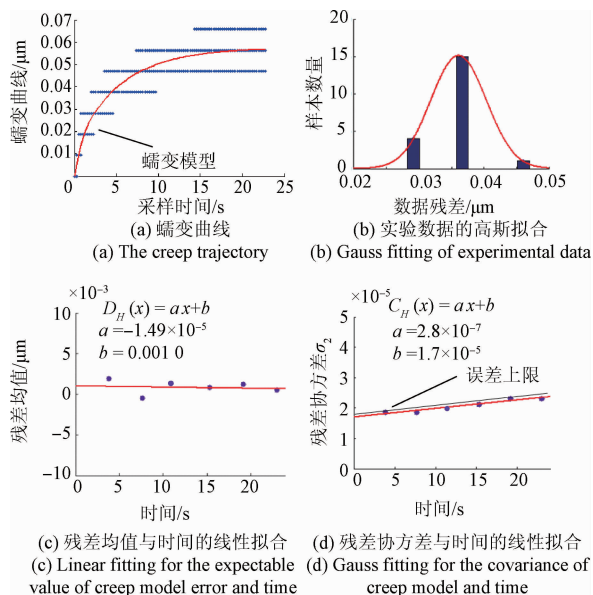


图 8 水平方向上蠕变模型的参数标定

Fig. 8 Parameters calibration of creep model on the horizontal direction

3) 温漂模型的参数标定

系统温漂模型是在不同时间内,使用连续扫描成像的数据统计温漂速度。AFM 在开机运行数个小时后,从实验结果得到的系统温漂速度在一个值附近上下波动,逐渐趋向稳定。根据实验统计结果,温漂速度满足高斯

分布,在 x 方向的温漂速度均值接近于 0,在 y 向的温漂速度接近于与一个正常数 $0.1\ \text{nm/s}$ 。

4.2 观测模型的标定

观测纳米颗粒中心 x_{kp} 估算探针位置。观测误差分为 3 个部分: $v_{\text{map}} \sim N(0, Q_{\text{map}})$, $v_{z,kp} \sim N(0, Q_{z,kp})$, $v_{z,\theta} \sim N(0, Q_{z,\theta})$ 。

1) 路标位置的标定

任务空间坐标系建立在样品表面中目标操作区域的扫描图像上,由于探针扫描时受到压电陶瓷驱动器非线性,系统温漂和其他不确定性的影响,图像中纳米颗粒中心位置的结果存在不确定性。本实验中误差(不确定性)的分析方法是对存在两个或者更多分散纳米颗粒的区域连续扫描 40 幅图像,先对这些代表样品形貌的地图配准(针对系统不同时刻扫描图像在 x 、 y 与 z 方向存在的整体偏移进行校正)后,在每一幅图中取 6 次不同的高度阈值将地图二值化,采用计算重心的方法来计算纳米颗粒中心的位置。统计这些数据,结果得出地图中纳米颗粒位置不确定分布满足高斯分布,且纳米颗粒在 x 方向的位置误差为 $5.0\ \text{nm}$, y 方向的位置误差为 $4.5\ \text{nm}$ 。

2) 局部扫描路标不同区域时的误差标定

在路标观测时,探针局部扫描纳米颗粒的不同区域,会影响计算纳米颗粒中心的结果。为了标定这种不确定性,通过在多幅图像中截取沿着扫描线上的像素点值作为实时扫描线,计算纳米颗粒中心的位置。该统计使用的数据是上述 40 幅纳米颗粒图像数据,每幅图中的局部扫描线为 11 条。统计这些位置的分布,得到路标观测中由于探针扫描纳米颗粒不同位置引起的纳米颗粒中心位置误差分布满足高斯分布,且误差为 $4.7\ \text{nm}$ 。

3) 局部扫描线偏转的误差标定

压电陶瓷扫描器的机械构造和蠕变效应造成局部扫描线的偏转,进而影响纳米颗粒中心的观测结果。为了获得和统计扫描线的偏转角 θ ,探针在扫描线的两个端点上压坑,根据两坑的位置计算偏转角。通过对 40 条扫描线偏转角的统计,得到偏转角均值小于 1° ,并且认为满足高斯分布,方差小于 0.392° 。由纳米颗粒中心到纳米颗粒扫描线垂距的极大值(即纳米颗粒的半径)得到扫描线偏转造成纳米颗粒中心计算结果的偏转极值接近 $2\ \text{nm}$ 。该结果和上述的误差方差约 $5\ \text{nm}$ 比较,对观测模型的影响可以忽略不计。

5 仿真与实验结果

本算法使用上述标定方法对运动模型和观测模型的参数进行标定。通过将基于路标观测与直接移动的探针定位实验和仿真结果进行对比,来验证参数标定方法的合理性与基于路标观测的探针定位算法的有效性。实验

中使用的设备是 Veeco 的 Dimension3100, 实验对象是分布在 CD 表面上的聚苯乙烯小球, 观测成像和操作使用的是 Macromesh 的 NSC15/ALBS/15 探针。

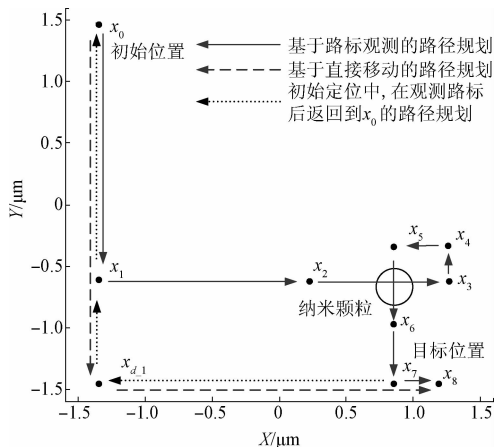


图9 探针运动控制方式演示

Fig.9 Control schematic diagram of AFM tip motion

仿真中探针移动路径的规划步骤为:1)将探针移动到 x_0 初始位置;2)分别采用路标观测的方法和直接移动的方法控制探针从起始点 x_0 移动到目标点 x_8 , 通过对比两种路径下探针的位置误差分布来验证基于路标观测方法的有效性。

探针从起始点 x_0 到目标点 x_8 的运动控制演示图如图9所示。假设探针在起点位置 x_0 的初始分布一致, 在没有观测路标的情况下, 探针经由 x_{d1} 直接移到 x_8 (路径由虚线标识)。在基于路标观测的探针移动过程中, 选择在目标位置附近的纳米颗粒作为路标进行观测和探针位置估算:1)将探针移到起始位置 x_0 ;2)探针从扫描区域中心 x_1 处移到位置 x_2 ;3)执行局部扫描 (移动路径: $x_2 \rightarrow x_3 \rightarrow \dots \rightarrow x_6$), 观测纳米颗粒中心, 使用观测模型在位置 x_6 进行最优估算;4)计算 x_6 到 x_8 的距离差, 根据运动模型移到 x_8 (移动路径: $x_6 \rightarrow x_7 \rightarrow x_8$)。该路径由图9中实线来标识。

基于直接移动和路标观测的探针定位实验分别是探针在 CD 表面上通过压坑的方式对其移动路径中的起始点 x_0 , 目标点 x_8 , 航路点 x_{d1} , 或者 $x_2, \dots, x_6$ 的位置进行记录。在基于路标观测的定位实验中, 探针在观测纳米颗粒后, 移到 x_6 进行位置估算, 然后根据探针运动模型再将探针移到位置 x_8 目标点。该实验需要对探针的位置分布进行统计, 具有如下3个明显的特点。

1) 为了得到上述探针位置的统计分布, 需要一定数量的重复性试验结果;

2) 鉴于探针位置分布的区域较小, 如果使用同一个纳米颗粒进行路标观测, 并压坑记录探针位置, 则可能导致不同组实验的压坑位置重叠, 不能得到实验记录;

3) 为了避免不同组实验的压坑位置重叠, 每组实验需要使用不同的纳米颗粒进行观测。

实验中, 将半径为 100 nm 左右的纳米颗粒分布在 CD 表面上, 通过成像方式寻找那些至少存在一个纳米颗粒, 且纳米颗粒分布分散的平整区域。然后算法停止扫描, 将探针停在扫描区域中心。接下来使用纳米颗粒作为路标进行探针定位的统计性实验。上述基于两种探针控制方式的对比实验各做了 50 组。每一组实验中的坐标系通过设定纳米颗粒中心为控制点进行配准。

图10(a)和(b)所示为基于直接移动与路标观测的探针位置分布仿真结果。图中, 点密集区域代表探针位置不确定性分布区域, 区域面积越大, 探针位置不确定性分布范围就越大。由图10(a)和(b)对比可以看出, 基于路标观测的探针定位路径下, 探针在 x_8 处的不确定性区域明显比直接移动策略下的小。图10(c)和(d)所示为 50 组实验中的一组实验结果。探针在位置上的压坑由图中虚线圈所标识。在基于路标观测的探针定位实验中将纳米颗粒中心作为坐标系控制点, 其坐标设置为 $(0.801 \mu\text{m}, -0.684 \mu\text{m})$ 。由图10(c)和(d)对比可以看出, 探针在基于路标观测情况下, 在目标位置 x_8 处的压坑更靠近 x_8 的实际位置。因此, 由图10可以初步得出, 基于路标观测的探针定位方法相对于直接移动的探针定位方法在目标位置 x_8 处探针位置的不确定性明显降低。

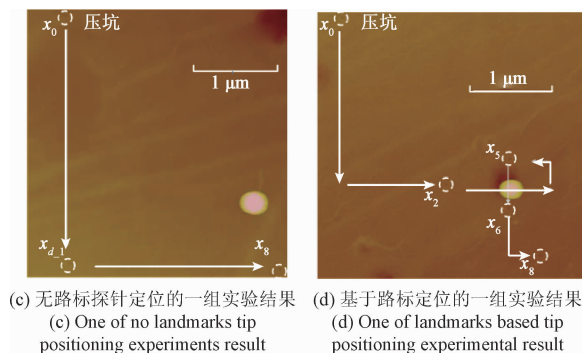
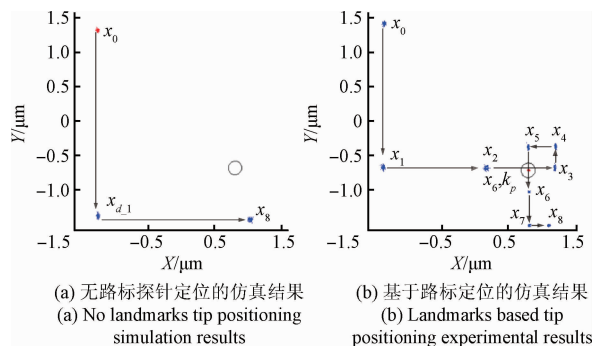


图10 探针位置误差分布的实验与仿真结果

Fig.10 Experimental and simulation results of tip error position distribution

统计仿真数据和 50 组实验结果,得到的探针直接移动过程中 x_0 、 $x_{d,1}$ 和 x_8 这 3 个位置的误差分布,以及探针基于路标观测过程中的 x_0 、 $x_1, \cdots, x_8$ 这些位置的误差分布,结果如表 1、2 所示。表 1 所示为探针经 $x_{d,1}$ 长距离从 x_0 直接移到 x_8 ,其位置误差的方差增加到约 20 nm。表 2 所示为探针通

过观测米颗粒,从 x_0 移动到 x_8 ,其位置误差的方差缩小到约 10 nm。由此可以更直接地得出,在基于路标观测的探针定位方法中,探针位置分布的不确定性显著降低。仿真结果和实验结果相差一个数量级之内,证明了模型参数标定的合理性和基于随机方法的路标观测定位算法的有效性。

表 1 无路标观测下探针的位置分布表

Table 1 Tip position distribution table under no landmarks

(μm)

	仿真数据				实验数据			
	μ_x	μ_y	σ_x	σ_y	μ_x	μ_y	σ_x	σ_y
x_0	-1.245	1.316	0.013	0.016	-1.333	1.435	0.014	0.018
$x_{d,1}$	-1.245	-1.381	0.013	0.021	-1.346	-1.324	0.014	0.024
x_8	1.031	-1.434	0.018	0.021	1.087	-1.374	0.021	0.025

表 2 路标观测下探针的位置分布表

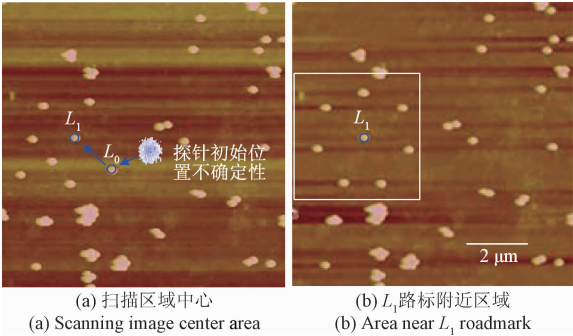
Table 2 Tip position distribution table under landmarks

(μm)

	仿真数据				实验数据			
	μ_x	μ_y	σ_x	σ_y	μ_x	μ_y	σ_x	σ_y
x_0	-1.245	1.316	0.013	0.016	-1.321	1.472	0.015	0.017
x_1	-1.245	-0.645	0.013	0.020	-	-	-	-
x_2	0.239	-0.7	0.016	0.020	-0.016	-0.603	0.017	0.019
$x_{3,kp}$	0.802	-0.701	0.006	0.020	-	-	-	-
x_3	1.22	-0.701	0.006	0.020	-	-	-	-
x_4	1.225	-0.407	0.006	0.020	-	-	-	-
x_5	0.804	-0.371	0.008	0.020	0.790	-	0.005	-
$x_{6,kp}$	0.771	-0.682	0.008	0.006	-	-	-	-
x_6	0.764	-0.985	0.008	0.006	0.781	-	0.009	-
x_7	0.761	-1.431	0.008	0.008	-	-	-	-
x_8	1.101	-1.471	0.009	0.008	1.174	-1.499	0.009	0.008

下面一组实验进一步验证该探针定位算法能提高纳米操作效率。实验内容是通过本算法观测地图中的特征物提高探针在目标位置的定位精度,然后操作纳米颗粒组装成正七边形。在进行组装前,首先对纳米颗粒分布区域进行成像,并搜索合适区域,然后停止扫描,将探针停在扫描区域的中心。扫描成像显示如图 11(a)所示,此时探针位置具有较大的不确定性。通过依次扫描路标 L_0 和 L_1 ,将探针在 L_1 路标附近进行定位提高其位置精度以便组装纳米颗粒(见图 11(b))。图 11(c)所示为将要操作的 7 个纳米颗粒的初始位置和目标位置,其中目标位置用圆圈表示,推动方向用虚线箭头表示。推动纳米颗粒后

结果如图 11(d)所示。该结果进一步验证了基于随机方法的 AFM 探针位置估算算法可以提高纳米操作效率。



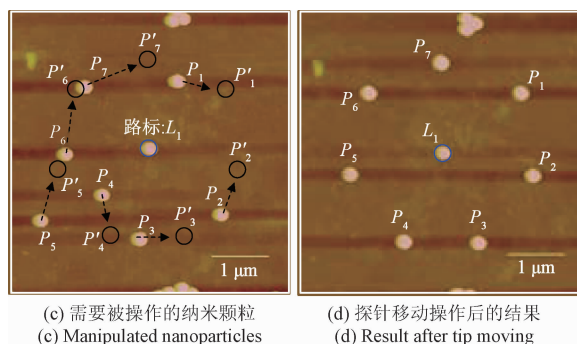


图 11 基于路标的探针移动操作实验

Fig. 11 Landmark based tip moving experiment

6 结 论

在 AFM 纳米操作中,针对探针驱动中存在的位置不确定性,提出了基于随机方法的路标定位方法。用概率统计的方式描述探针运动模型,建立集成了 PI 模型、蠕变模型和系统温漂模型的探针概率运动模型,并结合基于局部扫描的路标观测策略,采用 Kalman 滤波对探针位置进行实时最优估算。通过设计统计性的实验方案对运动模型和观测模型中的各个参数值进行标定。最后通过仿真和相应的实验结果验证了参数标定值的合理性和基于路标定位方法的有效性。本文中提出的方法,实时地解决了路标观测与探针扫描运动的耦合相关性,实现了在无需精确位置传感器的条件下,探针在任务空间中的精确定位,为基于 AFM 的自动化纳米操作技术发展奠定基础。

参考文献

- [1] BHUSHAN B. Springer handbook of nanotechnology, springer[J]. Sensor Review, 2013, 24(3):1761-1782.
- [2] HABIBULLAH H, POTA H R, PETERSEN I R. A novel control approach for high-precision positioning of a piezoelectric tube scanner [J]. IEEE Transactions on Automation Science and Engineering, 2017, 14(1): 325-336.
- [3] TUMA T, HAEBERLE W, ROTHUIZEN H, et al. Dual-stage nanopositioning for high-speed scanning probe microscopy [J]. IEEE/ASME Transactions on Mechatronics, 2014, 19(3):1035-1045.
- [4] HOU J, LIU L Q, WANG ZH Y, et al. AFM-based robotic nano-hand for stable manipulation at nanoscale [J]. IEEE Transactions on Automation Science and Engineering, 2013, 10(2):285-295.
- [5] LI G X, WANG W X, WANG Y CH, et al. Nano-

manipulation based on real-time compressive tracking [J]. IEEE Transactions on Nanotechnology, 2015, 14(5): 837-846.

- [6] 侯静, 吴成东, 董再励, 等. 基于 AFM 的虚拟纳米手操作策略研究 [J]. 仪器仪表学报, 2013, 34(5): 1167-1172.
HOU J, WU CH D, DONG Z L, et al. Research on virtual nano-hand strategy based on AFM [J]. Chinese Journal of Scientific Instrument, 2013, 34(5): 1167-1172.
- [7] 于志亮, 刘杨, 王岩, 等. 基于改进 PI 模型的压电陶瓷迟滞特性补偿控制 [J]. 仪器仪表学报, 2017, 38(1):129-135.
YU ZH L, LIU Y, WANG Y, et al. Hysteresis compensation and control of piezoelectric actuator based on an improved PI model [J]. Chinese Journal of Scientific Instrument, 2017, 38(1):129-135.
- [8] D'ACUNTO M, SALVETTI O. Pattern recognition methods for thermal drift correction in Atomic Force Microscopy imaging [J]. Pattern Recognition & Image Analysis, 2011, 21(1):9-19.
- [9] MOLENAAR R, PRANGSMA J C, VANDERWERF K O, et al. Microcantilever based distance control between a probe and a surface [J]. Review of Scientific Instruments, 2015, 86(6):105101.
- [10] YUAN S, LIU L Q, WANG ZH D, et al. A probabilistic approach for on-line positioning in nano manipulations [C]. 8th World Congress on Intelligent Control and Automation, 2010:450-455.
- [11] YUAN S, LIU L Q, WANG ZH D, et al. AFM tip on-line positioning by using the landmark in nano-manipulation [C]. IEEE Nanotechnology Materials and Devices Conference, 2010:75-80.
- [12] 黄建明, 张明达. 压力变送器温度补偿技术研究 [J]. 国外电子测量技术, 2017, 36(6):50-52.
HUANG J M, ZHANG M D. Research on temperature compensation of pressure transmitter [J]. Foreign Electronic Measurement Technology, 2017, 36(6): 50-52.
- [13] 戴雪梅, 郎朗, 陈孟元. 强跟踪平方根容积卡尔曼滤波 SLAM 算法 [J]. 电子测量与仪器学报, 2015, 29(10):1493-1499.
DAI X M, LANG L, CHEN M Y. Strong tracking square-root cubature Kalman filter based on SLAM algorithm [J]. Journal of Electronic Measurement and Instrumentation, 2015, 29(10):1493-1499.

- [14] 李联阳, 郎朗, 陈孟元. 基于 SR-CKF 的移动机器人动态目标跟踪算法[J]. 电子测量与仪器学报, 2016, 30(8):1198-1205.
- LI ZH Y, LANG L, CHEN M Y. Dynamic target tracking algorithm for mobile robot based on square-root cubature Kalman filter [J]. Journal of Electronic Measurement and Instrumentation, 2016, 30 (8): 1198-1205.
- [15] NASIR N Z M, ZAKARIA M A, RAZALI S, et al. Autonomous mobile robot localization using Kalman filter [C]. MATEC Web of Conferences, 2017, 90(1): 01069
- [16] 田雷, 陈俊杰, 崔玉国, 等. 基于 PI 迟滞模型的单压电变形镜开环控制[J]. 仪器仪表学报, 2017, 38(1):136-142.
- TIAN L, CHEN J J, CUI Y G, et al. Open loop control of unimorph piezoelectric deformable mirror based on PI hysteresis model [J]. Chinese Journal of Scientific Instrument, 2017, 38(1):136-142.
- [17] 刘泊, 郭建英, 孙永全. 压电陶瓷微位移驱动器建模与控制[J]. 光学精密工程, 2013, 21(6):1503-1509.
- LIU B, GUO J Y, SUN Y Q. Modeling and control for PZT micro-displacement Actuator. Optics and Precision Engineering, 2013, 21(6):1503-1509.

作者简介



袁帅, 分别在 2000 年和 2003 年于沈阳建筑大学获得学士和硕士学位, 2012 年于中国科学院大学获得博士学位, 现为沈阳建筑大学副教授, 主要研究方向为计算机技术与机器人定位、计算机图像处理。

E-mail: reidyuan@163.com

Yuan Shuai received his B. Sc. and M. Sc. degrees both from Shenyang Jianzhu University in 2000 and 2003, respectively, and received his Ph. D. degree from University of Chinese Academy of Sciences in 2012. He is now an associate professor in Shenyang Jianzhu University. His main research interests include computer control technology and robot localization, computer image processing.



尧晓 (通讯作者), 2015 年于沈阳建筑大学获得学士学位, 现为沈阳建筑大学硕士研究生, 主要研究方向为纳米操控、探针建模、仿真建模。

E-mail: m18002426818_1@163.com

Yao Xiao (Corresponding author) received her B. Sc. degree from Shenyang Jianzhu University in 2015. Now she is a M. Sc. candidate in Shenyang Jianzhu University. Her main research interests include nanomanipulation, tip modelling, and simulation modelling.