文章编号:1000-8152(2010)05-0557-06

适用于原子力显微镜先进扫描模式的学习控制系统

方勇纯,张玉东,贾 宁

(南开大学信息技术科学学院机器人与信息自动化研究所,天津 300071)

摘要:原子力显微镜(AFM)是进行纳米测量和操作的一种重要工具.针对原子力显微镜系统,论文提出了一种基于学习控制的先进扫描模式.具体而言,首先构造了一种适用于AFM的学习控制系统,它由对于扫描管动态特性的最优逆补偿环节和对于样品表面特性的学习算法两部分组成.然后,针对测量过程中扫描线之间的偏移,通过将常见的比例-积分控制算法与这种学习控制相结合,实现了一种基于学习算法的先进扫描模式.论文将这种模式应用于周期性样品来测试其性能,仿真和实验结果表明它可以显著提高测量的速度和精度,同时将样品与探针针尖的距离控制在一个合理的范围之内,以避免损坏样品或探针.这种先进扫描模式可以应用于对快速生物过程的实时监测,同时也可以用来完成重复刻写等纳米操作.

关键词: 原子力显微镜; 快速扫描模式; 最优逆控制; 学习控制 中图分类号: TP273 文献标识码: A

A learning-control system for

advanced atomic-force-microscopy scanning mode

FANG Yong-chun, ZHANG Yu-dong, JIA Ning

(Institute of Robotics and Automatic Information System, Nankai University, Tianjin 300071, China)

Abstract: Atomic-force-microscopy(AFM) is an important instrument for nanoscale measurement and manipulation. This paper proposes a learning-control advanced scanning mode for an AFM system. Specifically, a learning-control scheme is designed for the AFM system, which consists of an optimal inverse compensator for the AFM scanner dynamics and a learning algorithm dealing with the surface profile of the detected sample. Based on the observation of the offset among neighboring scanning lines, the aforementioned learning-control scheme combined with a conventional proportional-integral(PI) controller realizes the advanced AFM scanning mode. The designed scanning mode is then utilized for periodic samples to test its performance. As demonstrated by simulation and experimental results, this scanning mode can greatly increase the measurement speed and precision, and simultaneously keep the distance between the can-tilever tip and the detected sample within a reasonable range to avoid possible harm to them. Therefore, the proposed advanced scanning mode can be employed for online inspection of fast biologic processes, and it can also be utilized to implement such nanomanipulation as repetitive writing.

Key words: atomic-force-microscopy; advanced scanning mode; optimal inverse-control; learning control

1 引言(Introduction)

作为一种测量原子间作用力或者微结构参数的 工具,原子力显微镜自1986年问世以来,在纳米功能 材料、化工、食品、医药等多个领域,得到了广泛的 应用.近年来,美国、日本、意大利等发达国家纷纷 投入巨资,广泛开展原子力显微镜本身及其相关领 域的研究.

在测量过程中,原子力显微镜将具有极微小尖端(半径约几个埃米)的探针在被测样品的表面进行 扫描,然后通过观测和分析针尖与样品表面之间的 相互作用力来得到样品表面的轮廓^[1].其中,控制器 的主要作用是将连接探针的微悬臂的微小偏转作 为反馈信号,利用所设计的控制算法使扫描器在微 悬臂振动方向上进行适当的移动,从而使微悬臂的 弯曲等物理量稳定到设定值上.毫无疑问,控制器 是原子力显微镜的核心部件之一,它直接决定了系 统的测量性能^[2,3].当前的原子力显微镜中,控制 器一般采用比例积分(PI)算法,这种算法本身的缺 陷导致显微镜存在扫描速度慢,扫描范围小,测量 精度偏低等问题,这些问题已经严重阻碍了原子力 显微镜在快速生物反应等对象中的应用.因此,当 前国内外关于原子力显微镜系统的研究主要集中 在设计更为合理的算法来实现样品与探针尖端之

收稿日期: 2009-04-14; 收修改稿日期: 2009-06-16.

基金项目:国家自然科学基金资助项目(60875055);教育部新世纪优秀人才支持计划(NCET-06-0210).

间距离的精确控制^[4,5],以及充分利用所能检测的 信号,通过各种处理方法来提高对样品的测量与加 工精度^[6],或者提高显微镜扫描的速度.例如,美国 加州大学的Sebastian教授等人考虑到稳态信号等待 时间长,处理慢等缺点,提出利用卡尔曼滤波器来 处理扫描过程中所产生的暂态信号,如微悬臂的振 幅,相位等,并根据它们来提取样品的表面图像和特 征^[7].2004年,瑞士联邦科技研究所的Schitter博士等 人提出了一种将前馈与反馈相结合的AFM控制策 略,以适应高速扫描的要求^[8].美国爱荷华州立大学 的Salapaka教授等人设计了一种基于热噪声响应的 控制方案来使样品与微悬臂尖端之间的距离维持在 一个恒定的数值^[9].

本文针对原子力显微镜,设计了一种基于学习控制的先进扫描模式,它充分利用样品表面起伏的重复特征来加快AFM系统的响应,使扫描过程中,微悬臂的弯曲量在很短的时间内就能稳定到设定值,因此能实现样品的快速扫描,同时也可以将样品与针尖之间的距离控制在一个合理的范围之内,以避免

对它们造成损坏.这种扫描模式特别适用于表面起 伏规律性较强的样品,如标定光栅,某些生物样品 等,而对于其他一些样品,通过将该模式与普通模式 配合使用,也能提高原子力显微镜的扫描速度.

原子力显微镜基本结构(Structure of AFM systems)

原子力显微镜包括微悬臂-探针系统(微悬臂、探 针及针尖)、光检测系统(包括激光发生器和位置敏 感检测器)、压电扫描器(用来实现微悬臂/样品的定 位)和控制系统(控制扫描器做适当的移动)4个部分, 其基本结构如图1所示.图中,*XY*平面平行于样品 表面,*X*轴指向探针的扫描方向,而*Z*轴则垂直于样 品表面. $u(t) \in \mathbb{R}^1$ 表示由控制器施加到压电扫描器 上的电压, $z(t) \in \mathbb{R}^1$ 表示微悬臂在*Z*方向上的位移, $d(t) \in \mathbb{R}^1$ 代表样品表面的起伏, $h(t) \in \mathbb{R}^1$ 为探针针 尖与样品之间的间距:

$$h(t) = z(t) - d(t),$$
 (1)

而 $f(t) \in \mathbb{R}^1$ 则为两者之间的相互作用力.



Fig. 1 AFM system structure

在测量样品表面特性时,针尖与样品之间的相 互作用力使微悬臂发生微小弯曲,这种形变可以 通过激光检测装置进行放大,并将其转换为光斑 的偏移电压,然后将它与给定值 $V_{sp} \in \mathbb{R}^1$ 进行比较 后产生误差信号 $e(t) \in \mathbb{R}^1$,在此基础上就可以实 现闭环控制,即根据各种算法(通常是PI控制)计算 得到控制量u(t)来控制压电扫描器的运动,使探针 的形变保持为设定值,同时使针尖与样品之间 的作用力和距离也基本保持恒定.在这种情况下, 压电扫描器的位移量就间接反映了样品的表面形 貌.在扫描过程中,顺序变换样品和探针的接触位 置,并将各个扫描点的(*X*,*Y*)坐标以及所对应的 高度信息在计算机中记录下来,综合分析后便可 以获得样品在一定范围内的形貌. 第5期

3 AFM先进扫描方式设计(Design of advanced AFM scanning mode)

3.1 研究动机(Research motivation)

原子力显微镜在逐点扫描样品时,通过不断处 理稳态信息来获得样品表面的形貌.为了提高测 量速度,控制器必须使微悬臂在各个扫描点上快 速稳定.但是,压电扫描器的增益裕度很小,对于 现在普遍采用的PI控制算法而言,由于其控制增 益只能选取相对较小的数值,因此AFM系统的响 应速度较慢.此外,PI控制算法在扫描过程中没有 充分利用已有的扫描信息,如样品表面起伏和控 制量的变化规律等,因此当针尖遇到样品表面的 突起或者凹陷点时,控制器需要很长的时间才能 使其达到稳定,这是限制AFM扫描速度的一个关 键因素.

实际上,对于许多样品,如标定光栅,某些生物 样品等而言,其表面呈现出周期性的起伏特征.当 采用AFM对这些样品进行扫描时,可以利用这些 信息,不断总结前面若干个周期的控制电压和光 斑变化情况,在此基础上,利用自学习控制等算法, 估算出能使探针形变快速稳定的控制电压,并将 其施加到压电扫描管上,通过其运动来维持探针 与样品表面的距离基本恒定,并最终将光斑电压 快速稳定到设定值附近.

3.2 控制算法设计(Design of control algorithms)

在原子力显微镜中,控制器的作用是要计算出 合适的控制量u(t),使扫描过程中样品与探针尖端 之间的距离保持恒定.根据上述目标可以得知,在 扫描过程中,探针尖端应该随样品表面形貌d(t)而 上下移动,因此,设计如下的期望轨迹z_d ∈ ℝ¹:

$$z_{\rm d}(t) = d(t) + h_{\rm d},\tag{2}$$

其中: $h_d \in \mathbb{R}^+$ 表示扫描过程中, 针尖与样品之间的理想间距, 经过数学处理后, 它可以换算成图1中所示的系统给定值 V_{sp} :

$$V_{\rm sp} = K \cdot h_{\rm d},\tag{3}$$

其中 $K \in \mathbb{R}^+$ 为AFM系统中除扫描器以外其他部分的静态增益.对于期望轨迹 z_d ,如果控制器能够

使针尖的位移z(t)实现渐近跟踪的目标:

$$\lim_{t \to \infty} z(t) = z_{\rm d}(t),\tag{4}$$

则针尖与样品之间的实际距离h(t)具有如下极限:

$$\lim_{t \to \infty} h(t) = h_{\rm d}.$$
 (5)

然而,在AFM系统中,针尖与样品间的作用力为机 理未知的非线性力,此外,微悬臂末端的位移无法 通过测量得到,系统中唯一可以测量的信号只有 通过激光检测装置得到的微悬臂形变量.因此,在 样品表面起伏未知的情况下,如何精确地控制好 探针的位移是一个非常复杂的问题.

为了实现上述控制目标,首先注意到AFM系统 中,主要的动态特性来自于压电扫描器,对于一般 的AFM系统而言,其扫描器的响应时间相对较长, 必须对它们进行补偿才能使系统在各个扫描点上 实现快速稳定.因此,在设计控制器时,重点考虑 扫描器的动态特性,而忽略其他部分的动态特性. 基于以上分析,可以设计如图2所示的学习控制系 统,整个控制器由学习控制器和动态补偿器两个 部分串联而成.







在图2中,动态补偿器的主要作用就是尽可能 缩短压电扫描器的响应时间,为实现快速扫描奠 定基础.为此,笔者采用一种基于最优逆控制的设 计方法,首先对动态特性进行建模,在此基础上设 计一种最优逆控制器来补偿扫描器的动态特性. 对于本文研究的原子力显微镜系统,笔者实时采 集压电扫描器的输入-输出数据,对其进行分析和 处理后,可以得到压电陶瓷在Z方向上的5阶模型 如下^[10]:

$$G(z) = \frac{-0.00011z^4 + 0.001512z^3 + 0.01062z^2 + 0.01057z - 0.0008574}{z^5 - 0.9979z^4 - 0.6761z^3 + 0.6541z^2 + 0.5269z - 0.3975}.$$
(6)

对上述模型进行降阶分析,然后再对其求逆, 并考虑到实现等方面的原因,可以设计一种最优 逆控制器^[11]来得到控制信号u(t),以尽可能地补 偿扫描器的动态特性.

图2中,学习控制器的主要目的是为了对样 品表面起伏导致的误差变化实施有效控制.具 体而言, 笔者将样品表面的起伏d(t)作为一种作 用到系统上的未知干扰来进行处理, 并通过设 计一种基于重复学习控制方法的干扰抑制环 节 $u_1(t) \in \mathbb{R}^1$ 来实现对信号d(t)的补偿. 当样品 的形貌(高低起伏)在空间上呈现出周长为l的周期 性变化规律时, 在扫描过程中, 随着针尖的移动, 可以将这种起伏转换为周期为 $T \in \mathbb{R}^+$ 的干扰信 号d(t):

$$d(t+T) = d(t), \tag{7}$$

其中周期T可以通过l和扫描速度vx计算得到

$$T = \frac{l}{v_{\rm x}}.$$
 (8)

因此,可以设计如下基于学习算法的控制策略来 实现针尖的良好控制:

$$u_1(t) = k_1 e(t) + \tilde{d}(t),$$
 (9)

其中: $k_1 \in \mathbb{R}^+$ 代表反馈控制增益, 而 $\hat{d}(t) \in \mathbb{R}$ 则是 对于周期信号d(t)的在线估计, 它可以由以下的比 例型学习方法逐步估计得到

$$\hat{d}(t) = \hat{d}(t - T) + k_1 e(t),$$
 (10)

其中k₁ ∈ ℝ+代表正的学习增益.

注1 在图2所示的控制系统中,动态补偿器的性能 取决于模型的准确度.在前期研究中,通过实验方法为原子 力显微镜建立了较为可靠的数学模型^[10],并采用逆控制环 节对其动态特性进行了较好的补偿^[11].

3.3 基于学习算法的快速扫描模式(Learning-based high-speed scanning mode)

在设计学习控制策略时,笔者假设信号d(t)具 有完全周期的理想条件,但是,样品在空间上不可 能完全周期化,并且扫描过程中速度v_x也不可能 完全匀速,因此,信号d(t)只能具有近似周期的特 性.如何将上述理想情况下的设计转化为一种可 以实现的学习控制方法是必须重点考虑的一个问 题.

扫描样品时,原子力显微镜将对光斑电压以及 施加到扫描器上的控制电压这两部分信息进行综 合分析来得到样品的表面形貌.对于周期性样品 而言,每一行扫描线都将对应于样品表面数个乃 至数十个周期,因此,如果利用以上所设计的学习 控制算法,通过对前面数个周期光斑的起伏来逐 步完善对于样品表面特性的估计,并计算得到控 制信号u1(t)和u(t),便可以实现快速扫描,同时将 微悬臂针尖与样品之间的距离控制在一个合理的 范围之内.显然,在同一根扫描线之内,这种学习 方法不难实现.但是,对于前后两根扫描线而言, 由于受到迟滞等各种因素的影响,此时并不能完 全保证探针将从和上一行完全一致的地方,或者 从一个完整周期的起始点开始扫描.为了处理好 这个问题,在每一行的起始位置,采用常见的PI算 法来计算控制量,当达到一个周期的开始位置时, 样品的突然起伏将导致光斑的剧烈变化,因此,可 以通过对光斑信号的监测来确定周期的起点,并 从这一点开始,切换回学习控制算法,以加快微悬 臂的响应速度,并将探针针尖与样品之间的距离 控制在一个合适的范围之内.

4 仿真结果(Simulation results)

为了测试本文所设计的先进扫描方法,笔者 在MATLAB/Simulink环境下进行了仿真测试.在 仿真过程中,运用所设计的基于学习控制的模式 来扫描基本频率为10 Hz并缓慢变化的正弦样品:

$$d(t) = \sin((1+t/100)20\pi t + \frac{\pi}{2}).$$
(11)

因为真实扫描样品通常不具有严格的周期性, 为进一步检验这种学习算法的鲁棒性,在仿真过 程中,笔者对该正弦信号加入5%的随机噪声.为 了便于对比,笔者同时采用通常的PI控制模式来 扫描该正弦样品.取学习控制参数k₁, k₁, 及PI比例 增益k_p和积分增益k_i如下:

$$k_{\rm l} = 2.8, k_1 = 2.2, k_{\rm p} = 5, k_{\rm i} = 3,$$
 (12)

得到的结果如图3和4所示.

图3,4中,上下图分别记录了学习控制和IP控制的输出轨迹和误差曲线.比较图3和图4的仿真结果可以看出:学习控制方法得到的轨迹和期望轨迹更为吻合,因此,当采用这种模式来扫描周期性样品时,可以较好地控制样品与针尖之间的距离,以避免损坏样品或者探针.





5000 nm, 分辨率为200*200. 将扫描频率分别设 为5 Hz和10 Hz(即每秒钟分别扫描5行和10行), 应 用本文所设计的先进扫描模式对该样品进行测试, 得到的结果如图5所示. 与常规的成像方法不同的 是, 图5中的结果利用了AFM系统的动态特性来进 行成像^[13], 因而扫描结果更能反映样品的真实形 貌. 从图5的实验结果可以看出: 基于学习控制的 先进扫描策略在相对较高的扫描频率下, 仍然可 以较为准确地反映标定光栅的表面起伏状况. 此 外, 当扫描频率从5 Hz提高到10 Hz时, 成像结果没 有明显恶化, 表明这种基于学习控制的扫描模式 有望实现周期性样品的高速扫描.



图 5 学习控制实验结果 Fig. 5 Experiment result of learning control

实验与应用(Experiment and applications)

对于本文所设计的基于学习方法的先进扫 描模式,本文在基于RTLinux的开放式AFM系统 上^[12]对其性能进行了进一步的实验测试.

5

实验选择爱沙尼亚μ Masch公司生产的一维标 定光栅作为测试样品,该样品的周期为278 nm, 台阶高度为100 nm±10 nm. 设定扫描范围为

6 结论(Conclusion)

为了提高原子力显微镜的扫描速度,同时将针 尖与样品之间的距离控制在一个合理的范围之内, 本文设计并实现了一种基于学习算法的AFM先进 扫描模式.具体而言,论文首先设计了一种适用 于AFM的学习控制系统,它由对于扫描器的最优 逆控制动态补偿算法和对于样品表面特性的学习 算法两部分串联而成.然后,针对样品测量过程 中, 扫描线之间出现的偏移问题, 通过将PI控制算 法与这种学习控制系统相结合, 实现了一种基于 学习算法的先进扫描模式. 仿真和实验结果验证 了这种基于学习控制的先进扫描方法的优良性能. 特别是当应用这种模式来扫描具有周期性起伏特 征的软样品时, 它可以显著提高原子力显微镜的 扫描速度, 并控制好样品与针尖之间的距离, 以避 免损坏样品或者探针. 值得指出的是, 在材料科学 及生命科学等领域, 大量样品具有固定的周期, 因 而采用这种基于学习控制的AFM快速扫描模式, 将明显改善原子力显微镜的成像性能, 进一步拓 宽其应用范围. 后续研究将对这种先进扫描模式 完成进一步的实验测试, 并将其性能不断改进后 应用于实际的AFM系统中.

参考文献(References):

- GIESSIBL F J. Advances of atomic force microscopy[J]. Reviews of Modern Physics, 2003, 75(3): 949 – 983.
- [2] ABRAMOVITCH D Y, ANDERSSON S B, PAO L Y, et al. A tutorial on the mechanisms, dynamics, and control of atomic force microscopes[C] //Proceedings of the American Control Conference. New York, USA: IEEE, 2007, 7: 3488 – 3502.
- [3] BUTTERWORTH J, PAO L Y, ABRAMOVITCH D Y. Architectures for tracking control in atomic force microscopes[C] //Proceedings of the IFAC World Congress. Seoul, Korea: IFAC Press, 2008, 7: 8236 – 8250.
- [4] AGARWAL P, SALAPAKA M V. Control and systems approaches to atomic force microscopy[C] //Proceedings of the IFAC World Congress. Seoul, Korea: IFAC Press, 2008, 7: 10456 – 10467.
- [5] FANG Y, FEEMSTER M, DAWSON D, et al. Nonlinear control techniques for an atomic force microscope system[J]. *Journal of Control Theory and Applications*, 2005, 3(1): 85 – 92.
- [6] FANG Y, FEEMSTER M, DAWSON D M, et al. Active interaction force identification for atomic force microscope applications[C] //Proceedings of the IEEE Conference on Decision and Control. Las Vegas, USA: IEEE, 2002, 12: 3678 – 3683.

- [7] SEBASTIAN A, SAHOO D R, SALAPAKA M V. An observer based sample detection scheme for atomic force microscopy[C] //Proceedings of the IEEE Conference on Decision and Control. Hawaii, USA: IEEE, 2003, 12: 2132 – 2137.
- [8] SCHITTER G, ALLGÖWER F, STEMMER A. A new control strategy for high-speed atomic force microscopy[J]. *Nanotechnology*, 2004, 15(1): 108 – 114.
- [9] GANNEPALLI A, SEBASTIAN A, CLEVELAND J P, et al. Thermal noise response based control of tip-sample separation in AFM[C] //Proceedings of the American Control Conference. Boston, USA: IEEE, 2004, 7: 3122 – 3127.
- [10] ZHOU X, FANG Y, DONG X, et al. System modeling of an AFM system in Z-axis[C] //Proceedings of the IEEE Conference on Nanotechnology. Hong Kong, China: IEEE, 2007, 8: 96 – 99.
- [11] 张玉东,方勇纯,董晓坤,等. 基于预测轨迹逆控制的AFM扫描方法[C] // 中国控制会议论文集. 昆明, 中国:北京航空航天大学出版社, 2008, 7: 744 748.
 (ZHANG Yudong, FANG Yongchun, DONG Xiaokun, et al. Predictive trajectory based inverse control of AFM scanning method[C] //Proceedings of the Chinese Control Conference. Kunming, China: Beihang Press, 2008, 7: 744 748.)
- [12] 周娴玮,方勇纯,董晓坤,等. 基于RTLinux的AFM实时反馈控制系统设计[J]. 计算机工程, 2008, 34(15): 226 228.
 (ZHOU Xianwei, FANG Yongchun, DONG Xiaokun, et al. Real-time feedback control system for AFM based on RTLinux[J]. Computer Engineering, 2008, 34(15): 226 228.)
- [13] 董晓坤,方勇纯,周娴玮,等.基于压电扫描管动态特性分析的AFM成像方法研究[J].高技术通讯,2008,18(1):54-58. (DONG Xiaokun, FANG Yongchun, ZHOU Xianwei, et al. An AFM imaging method based on analysis of piezo-scanner's dynamic characteristic[J]. *High Technology Letters*, 2008, 18(1):54-58.)

作者简介:

方勇纯 (1973—), 男, 教授, 博士生导师, IEEE高级会员, 主要

研究方向为复杂系统非线性控制、机器人视觉控制, E-mail: yfang@robot.nankai.edu.cn:

张玉东 (1984—), 男, 博士研究生, 主要研究方向为微纳米系

统、学习控制、非线性控制, E-mail: zhangyd@robot.nankai.edu.cn;

```
贾 宁 (1985—), 女, 硕士研究生, 主要研究方向为微纳米系 统、虚拟现实, E-mail: jian@robot.nankai.edu.cn.
```