

扫描探针显微镜智能自动化 策略研究及应用

作者：黄白元

专业：控制理论与控制工程

导师：费敏锐



上海大学出版社

· 上海 ·

2004 年上海大学博士学位论文

扫描探针显微镜智能化 策略研究及应用

作 者： 黄自元

专 业： 控制理论与控制工程

导 师： 费敏锐

上海大学出版社

• 上 海 •

Shanghai University Doctoral Dissertation (2004)

Research on Intelligent Automation Strategy for SPM and Its Applications

Candidate: Huang Zi-yuan

Major: Control Theory and Control Engineering

Supervisor: Prof. Fei Min-rui

Shanghai University Press

• Shanghai •

上海大学

本论文经答辩委员会全体委员审查，确认符合上海大学博士学位论文质量要求。

答辩委员会名单：

主任：	席裕庚	教授，上海交通大学	200030
委员：	应启夏	教授，上海理工大学	200093
	董德纯	教授，同济大学	200433
	范 凯	研究员，上海工业自动化仪表研究所	200233
	顾幸生	教授，华东理工大学	200237
	胡 俊	教授，上海交通大学	200030
	曹家麟	教授，上海大学	200072
导师：	费敏锐	教授，上海大学	200072

评阅人名单:

席裕庚	教授, 上海交通大学	200030
汤天浩	教授, 上海海运学院	200135
顾幸生	教授, 华东理工大学	200237

评议人名单:

丁永生	教授, 东华大学	200051
胡 俊	教授, 上海交通大学	200030
郎文鹏	教授, 上海大学	200072
宋志坚	教授, 复旦大学	200032

答辩委员会对论文的评语

黄自元同学的博士学位论文“扫描探针显微镜智能自动化策略研究及应用”以上海市科委纳米专项基金项目和上海爱建纳米科技发展有限公司合作项目为背景,对扫描探针显微镜中压电执行器的滞后补偿控制和非线性、非正交误差校正以及系统标定等问题,进行了深入的理论分析和应用研究,论文选题具有重要的理论意义和实用价值。

论文对国内外扫描探针显微镜的自动化关键技术的研究现状作了较为详细的综述。针对对象存在的大滞后问题,提出了鲁棒自整定 Smith 预估控制算法,提高了控制器的鲁棒性和自适应能力针对 x 、 y 方向压电执行器的回滞非线性,提出的自适应范围 DNA 软计算对其建模,解决了传统 DNA 计算中存在的编码长度与计算精度之间的矛盾,在此基础上给出了两种回滞非线性校正策略:①在线辨识和实时校正策略;②基于双向多项式模型的回滞非线性校正策略。论文还引入了标定因子的概念,提出了 SPM 标定算法,通过调整标定因子,可不断提高标定精度。作者将其部分研究成果应用实际产品的研制,获得了良好的效果。

论文条理清晰、层次分明、分析严谨,取得了创新性的研究成果。论文表明作者具有坚实宽广的基础理论和系统深入的专业知识,具备很强的独立科研能力。

在答辩过程中,黄自元同学叙述清楚,回答问题正确。

答辩委员会表决结果

经答辩委员会表决,全票同意通过黄自元同学的博士学位论文答辩,建议授予工学博士学位。

答辩委员会主席: **席裕庚**

2004 年 4 月 28 日

摘 要

纳米科技已经成为 21 世纪最核心的技术之一,而纳米科技的竞争,很大程度上体现在纳米表征和纳米操纵仪器的竞争.提高作为纳米科技的“眼”和“手”的扫描探针显微镜(SPM)的测量和定位精度,是纳米仪器界始终追求的目标.本文就扫描探针显微镜自动化关键技术——压电执行器的滞后补偿控制和非线性、非正交误差校正以及 SPM 标定等问题,进行了深入分析和应用研究,主要成果如下:

(1) 针对扫描探针显微镜控制系统中包括 z 方向执行器、探针和被测样品在内的广义被控对象存在的大滞后问题,设计了鲁棒自整定 Smith 预估控制器,使得闭环系统不仅具有在过程增益、滞后时间和时间常数等动态性能参数变化时的鲁棒稳定性,而且具有良好的动态特性,如小超调、快响应速度和强抗干扰能力等等.

(2) 针对传统 DNA 计算中存在的设计变量编码长度与计算精度之间的矛盾,提出了自适应范围 DNA(ARDNA)软计算方法,将设计变量取值范围自适应机制引入 DNA 软计算,给出了基于标准正态分布表计算分位数 Pr 的简化公式,通过有限长的 DNA 编码实现了预定的计算精度.函数优化应用实例表明了 ARDNA 对设计变量的取值范围无需先验知识,且具有较强的全局搜索能力.

(3) 针对扫描探针显微镜中 x 、 y 压电执行器的回滞非线性问题,提出了回滞非线性在线辨识和实时校正策略.该策略中,首

先基于对 x 、 y 压电执行器的非线性特性分析, 建立了其回滞非线性参数化模型结构, 采用 ARDNA 软计算方法, 同时优化模型结构和模型参数, 获取压电执行器最优回滞非线性模型. 接着, 将所获得的回滞非线性模型作为参考模型, 通过设计增量式反馈控制器, 构建压电执行器回滞伪逆模型. 然后, 为消除压电执行器回滞非线性建模误差, 采用递推最小二乘法(简称 RLS), 在线辨识压电执行器, 实时修正其参考模型, 以确保所构建伪逆模型逼近其逆模型. 最后, 压电执行器与其伪逆模型串连, 实现了回滞非线性校正. 数字仿真结果验证了算法的有效性.

(4) 智能校正和标定的实现策略研究. 为获取 x 、 y 压电执行器的输入-输出数据, 以建立其模型, 给出了基于一维或二维标准光栅 SPM 图像的特征数据测量算法. 根据 SPM 扫描机理并考虑压电执行器回滞非线性影响, 提出了 x 、 y 压电执行器双向多项式模型, 给出了相应的非线性校正算法. 基于经非线性校正的二维标准光栅的 SPM 图像, 给出了 x 、 y 压电执行器夹角测量算法和非正交误差校正算法. 另外, 基于本文引入的压电执行器标定因子的概念, 提出了相应的标定算法.

(5) 基于上海爱建纳米科技发展有限公司研制的 AJ-I 等系列产品的系统框架, 将系统辨识、Smith 预估和 PI 控制相结合, 开发了 Smith 在线辨识预估+PI 控制算法, 并嵌入到 AJ-I 型扫描隧道显微镜(STM, 为 SPM 系列中的产品)的 DSP 控制器中, 获得良好的控制效果, 基本满足了 STM 对恒流的要求. 将 x 、 y 压电执行器非线性、非正交误差校正和 SPM 标定算法编制到 AJ-III 型原子力显微镜(AFM, 为 SPM 系列中的产品)的 DSP 控制器中, 并开发了一套 SPM 中压电执行器模型参数与 x 、 y 方向压电执行器夹角和标定因子等参数的获取软件, 以配合实现非线性、非正

交误差校正和 SPM 标定. 实验结果表明: ①仅需用户点击几次鼠标, 即可得到压电执行器模型参数以及 x 、 y 方向压电执行器夹角和标定因子等参数, 实现非线性和非正交误差校正, 基本消除了图像特征扭曲; ②仅仅通过设定和修改 x 、 y 方向压电执行器标定因子, 即可实现扫描探针显微镜的标定, 在降低了标定复杂度的同时, 提高了标定精度, 从而增强了 SPM 自动化和智能化程度.

关键词 扫描隧道显微镜(STM), 原子力显微镜(AFM), 扫描探针显微镜(SPM), 鲁棒控制, 自适应范围 DNA 软计算(ARDNA), 回滞非线性, SPM 标定

Abstract

As high-tech of 21st century, nanometer science and technology have been focused on by the world. And almost all countries are competing more and more heatedly in the R&D of nanometer microscope in order to have an advantage in the nanometer research. It is an objective for nanometer instrument researcher to improve the measurement precision of scanning probe microscope (SPM), the eye and hand of nanometer science and technology. In this paper, I analyze the working mechanism of SPM and research deeply the key automation problems, which include: (1) delay compensation control; (2) hysteresis nonlinearity correction; (3) nonorthogonality correction; and (4) SPM calibration. The main contributions are as follows:

A robust auto-tuning Smith prediction controller was designed to resolve the long delay time problem of the general controlled object, which consisted of z-PZT, probe and scanned sample etc. The simulation results indicate that the closed system not only is stable robustly when gain, time constant and delay time of the process vary with the time in the given scope, but also is of good dynamic characteristics, which are small overshoots, fast response and strong ability to eliminate noise and so on.

An adaptive-range DNA (ARDNA) soft computing was brought forward. ARDNA solves the contradiction between long coding and high computing precision, which exists in the traditional DNA soft computing. The method is used in function optimization and the simulation results show that ARDNA not only does not need the prior knowledge about the range of the design variables, but also is of strong ability to search globally.

Based on the analysis of the nonlinearity of the x -PZT and y -PZT of SPM, the structure of parameterized hysteresis model was constructed. And the optimized model of PZT was attained by ARDNA, which could optimize the structure and parameters of model simultaneously. Then, the model was used as the reference model, and an incremental feedback controller was designed to get the pseudo-inverse model of PZT. In order to eliminate the error between PZT and its reference model, recursive least square (RLS) was introduced to identify the PZT on line. When RLS was stable, the pseudo-inverse model of PZT converged to its inverse model. At last, the PZT was in series with its pseudo-inverse model to correct its nonlinearity. The simulation results indicate that the nonlinearity correction method is effective.

A forward-backward polynomial model was given, which could describe the hysteresis of PZT approximately. In order to get the model, the characteristic data measurement algorithm was

investigated from the SPM image of one-dimension or two-dimension raster to get the input-output of PZT. Based on the model, the nonlinearity correction algorithm was put forward to eliminate the image distortion. In addition, we researched the measurement algorithm for the degree of nonorthogonality of x -PZT and y -PZT and the corresponding nonorthogonality correction algorithm.

In this paper, the system identification algorithm is incorporated with Smith predictor to realize Smith on-line identification prediction control in order to compensate the delay of the general controlled object. And it was successfully applied in the AJ-I STM, which was manufactured in the Shanghai Aijian Nanometer Sci. & Tech. Corporation Ltd. The experiment results demonstrate that the method is of strong self-adaptability. And it meets the requirement on tunneling current in AJ-I STM. The nonlinearity correction algorithm, nonorthogonality correction algorithm and SPM calibration algorithm were successfully used in AJ-III AFM which was manufactured in the Shanghai Aijian Nanometer Sci. & Tech. Corporation Ltd. And a corresponding software was developed by Visual C in order to obtain the parameters for the above-mentioned algorithms. The experiment results demonstrate that: 1) all of parameters can be obtained only through few mouse pressing and the image distortion can be

eliminated; and 2) the SPM calibration can be realized only through adjust the calibration parameters, which reduces the complexity of SPM calibration and improves the precision of SPM calibration. In a word, the automation and intelligence of SPM are strengthened.

Key words scanning tunneling microscope (STM), atomic force microscope (AFM), scanning probe microscope (SPM), robust control, adaptive range DNA soft computing (ARDNA), hysteresis nonlinearity, SPM calibration

目 录

第一章 绪 论	1
1.1 引言	1
1.2 扫描探针显微镜的发展历程	3
1.3 扫描探针显微镜自动化关键技术的研究现状	6
1.4 扫描探针显微镜研究和应用中主要存在的 自动化问题	13
第二章 扫描探针显微镜及其执行机构的工作机理	19
2.1 扫描探针显微镜系统结构	19
2.2 扫描探针显微镜的工作机理	21
2.3 扫描探针显微镜中执行机构的特性描述 与分析对比	24
2.4 压电执行器在 SPM 中的应用机理及改进方案	35
2.5 本章小结	38
第三章 SPM 自动化的理论基础	39
3.1 引言	39
3.2 H_{∞} 鲁棒控制	43
3.3 自适应滞后补偿控制	47
3.4 DNA 软计算	55
3.5 本章小结	60
第四章 滞后补偿控制策略	61
4.1 STM 反馈控制网络	61
4.2 SPM 控制策略	64

4.3 本章小结.....	83
第五章 回滞非线性校正策略.....	85
5.1 引言.....	85
5.2 ARDNA 软计算.....	86
5.3 回滞非线性校正.....	94
5.4 本章小结.....	114
第六章 SPM 智能校正及标定的实现策略研究.....	116
6.1 特征数据测量.....	116
6.2 压电执行器建模与非线性校正算法.....	122
6.3 非正交误差测量与校正算法.....	123
6.4 标定算法.....	125
6.5 本章小结.....	126
第七章 SPM 智能自动化系统设计及实验.....	127
7.1 软件设计与开发.....	128
7.2 实验设计与结果分析.....	133
7.3 本章小结.....	141
第八章 总结与展望.....	143
8.1 本文总结.....	143
8.2 展望.....	145
参考文献.....	147
致 谢.....	165

第一章 绪 论

1.1 引 言

最早提出纳米尺度上科学和技术问题的是著名物理学家、诺贝尔奖获得者 Richard. Feynman 教授. 1959 年, 他在当年的美国物理学会年会上的发言中曾对未来的物理学作了一个精彩的预言^[1]: “如果我们按自己的愿望一个一个地排列原子, 将会出现什么呢? 这些物质将有什么性质? 这是十分有趣的问题. 虽然我现在不能精确地回答它, 但我决不怀疑当我们能在如此小的尺寸上进行操纵时, 将得到具有大量独特性质的物质.”

1982 年, IBM 苏黎世实验室的 Gerd.Binning 博士、Heinrich. Rohrer 博士及其同事们发明了 Feynman 教授所期望的纳米科技研究的重要仪器—用于微观表征的扫描隧道显微镜(STM)^[2], 观察到了 Si(111)表面的原子结构, 这是人类第一次直接观察到单个原子, 从而根本上改变了人类对微观世界的认识水平, 因此该发明引起了轰动, 并于 1986 年获得了物理学诺贝尔奖.

STM 以及后来基于 STM 机理所研制的原子力显微镜(AFM)^[3]、扫描近场光子显微镜(SNOM)^[4-7]等微观表征和操纵技术, 对纳米科技的兴起和发展都起到了积极的促进作用.

1990 年 7 月, 第一届纳米科学技术会议在美国巴尔的摩举办, 标志着纳米科学技术的诞生. 纳米科技涉及的尺度通常是