

基于 AFM 的虚拟纳米手操作策略研究*

侯静^{1,2,3}, 吴成东¹, 董再励³, 李孟歆², 王文学³

(1. 东北大学信息科学与工程学院 沈阳 110004; 2. 沈阳建筑大学信息与控制工程学院 沈阳 110168;
3. 中国科学院沈阳自动化研究所机器人学国家重点实验室 沈阳 110016)

摘要: 针对纳米操作过程中存在的不确定性及 AFM 单探针带来的纳米粒子的稳定操作问题, 提出了虚拟纳米手操作策略。该策略采用蒙特卡洛方法描述粒子的不确定性, 在纳米粒子推动操作的运动学模型基础上, 对 AFM 探针的作用参数进行规划, 模拟多探针并行操作效果, 将粒子的中心位置限制在规定误差范围内, 从而可以避免操作过程中粒子的丢失, 实现粒子的稳定高精度纳米操作, 仿真结果与实验操作结果相对比, 验证了虚拟纳米手操作策略的有效性。

关键词: 虚拟纳米手策略; 纳米粒子; 稳定纳米操作; AFM

中图分类号: 0793 TN16 文献标识码: A 国家标准学科分类代码: 460.4010

Research on virtual nano-hand strategy based on AFM

Hou Jing^{1,2,3}, Wu Chengdong¹, Dong Zaili³, Li Mengxin², Wang Wenxue³

(1. College of Information Science and Engineering, Northeastern University, Shenyang 110004, China;
2. School of Information and Control Engineering, Shenyang Jianzhu University, Shenyang 110168, China;
3. State Key Laboratory of Robotics, Shenyang Institute of Automation, CAS, Shenyang 110016, China)

Abstract: Aiming at the problems that there exist uncertainties, such as the uncertainty of the initial position of the nanoparticle and most of AFMs only have one tip as the end effector, which causes the stable operation problems such as object lost and low operation efficiency, in this paper, a virtual nano-hand pushing strategy is proposed. This strategy adopts Monte Carlo method to describe the position uncertainty and error distribution. Based on the kinematic model of the nanoparticle pushing manipulation, the pushing parameters of the AFM tip is planned to mimic multi-fingered hand with single AFM tip. This strategy can push the nanoparticle into a bounded target area with a given probability and avoid the particle losing, so the stable and reliable nanomanipulation can be realized. Simulation results and experiment operation results were compared, which verifies the validity of the proposed virtual nano-hand manipulation method.

Keywords: virtual nano-hand strategy; nanoparticle; stable nanomanipulation; atomic force microscope (AFM)

1 引言

原子力显微镜 (atomic force microscope, AFM) 由于其普遍适用性及高分辨率特性已经成为制造纳米器件与装置的主要工具^[1-3]。纳米粒子作为常见纳米材料之一, 用其搭建的特定阵列与结构已在数据存储、纳米传感器及

器件制造等方面得到了广泛的应用。然而, 基于 AFM 的纳米操作仍存在着一些挑战, 尤其是缺乏实时视觉反馈信息等问题, 大大限制了 AFM 纳米操作的应用与发展。

为解决 AFM 粒子操作存在的问题, 研究者提出了多种解决方案。文献 [4-5] 从探针建模及图像重构方面进行了研究; LI 应用增强现实技术利用操作过程中的实时力信息更新操作界面进行纳米粒子操作^[6-7]; CHEN 等发展了 CAD (com-

收稿日期: 2012-09 Received Date: 2012-09

* 基金项目: 国家自然科学基金重点项目 (61106109, 61175103)、辽宁省教育厅科学研究一般项目 (L2012213)、中国博士后科学基金项目 (2012M520654) 资助

puter aided design) 纳米装配系统^[8] 这些方法在一定程度上解决了缺乏实时反馈信号带来的问题。针对于空间不确定性的补偿问题 研究者主要采用路标定位方法^[9] 和卡尔曼滤波方法^[10]。此外 研究者发展了多种操作方法 ZHAO 采用连续推动的方式操作粒子^[11] XU 提出了连续并行推动操作方式^[12]。

上述方法虽然在一定程度上解决了纳米操作的问题 但仍属于传统的 AFM 操作方法 无法解决操作过程中粒子的丢失问题。此外 由蠕变、迟滞和温漂引起的空间不确定性^[13] 造成定位不准确也是造成操作失败的主要因素^[14-15]。为了避免操作过程中粒子丢失 解决单探针特性及纳米操作环境不确定性带来的操作问题 进一步提高纳米操作效率, 最根本的解决方法是能够实时确定操作中粒子的位置 且能够将粒子始终控制在允许的误差范围内 据此 本文创新地提出了机器人纳米操作新方法——虚拟纳米手操作策略。该操作方法通过粒子的运动学模型预测操作后粒子中心的位置 从而进行探针作用参数的规划 使粒子在允许误差范围内的稳定操作 避免了丢失现象的发生 提高了纳米粒子的操作精度和操作效率。

2 虚拟纳米手操作概念与系统构建

2.1 虚拟纳米手操作概念

传统的 AFM 操作方法是面向对象的操作(target oriented pushing ,TOP) ,即操作方向始终由现有位置指向目标位置^[12] ,如图 1 所示。TOP 操作要求探针针尖作用于纳米粒子的中心位置 ,但实际上由于纳米操作存在的诸多不确定性 ,很难实现 TOP 的操作要求 ,因此 ,操作结果总是偏离预定的操作轨迹 ,直至探针与粒子脱离。

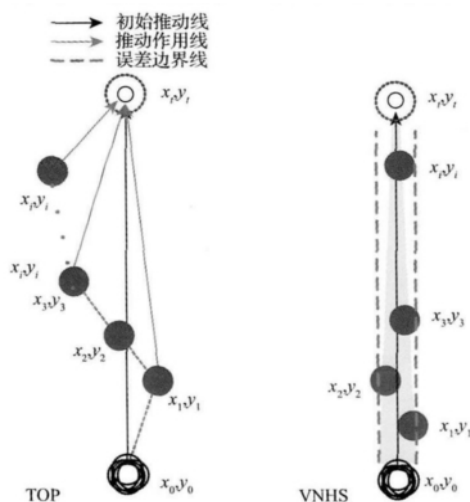


图 1 面向对象的操作与虚拟纳米手操作示意图
Fig.1 The manipulation process of TOP and VNHS algorithms

为了实现稳定、高效的纳米操作 本文提出了一种基于作业规划概念的虚拟纳米手操作策略。该策略引入了机器人条件封闭概念 ,即通过蒙特卡洛方法估计操作过程中对象位置的有界误差分布 ,设置相应操作参数 ,以保证操作过程中对象运动误差始终限定在允许的误差边界范围内 ,从而避免操作失败现象 ,如图 1 所示 ,这种作业称之为虚拟纳米手操作方式(virtual nano-hand strategy ,VNHS)。

VNHS 操作是基于探针运动控制策略 ,即通过对操作对象的尺度和运动学误差分布 规划探针运动模型 ,以高频驱动探针模式构成对操作对象的连续操作力 ,形成由微小行程组合的特定驱动模型 ,以模拟多探针并行操作效果 达到虚拟多手指同时作用的力作用结构 ,使操作对象的被动运动误差分布限制在允许范围内 ,达到不确定条件下的确定性操作 ,从根本上解决了探针操作过程鲁棒性问题。

2.2 虚拟纳米手操作系统构建

由于虚拟纳米手操作策略中探针运动路径的规划执行可编程操作 因此 ,应用机器人监控理论方法和纳米操作特点 建立了基于 AFM 和人机交互界面的实验系统 ,如图 2 所示。

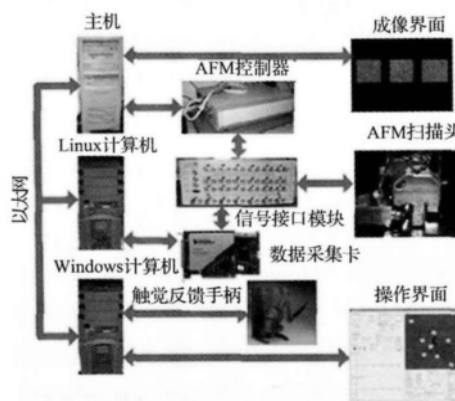


图 2 基于 AFM 和人机交互界面的操作系统
Fig.2 The nano-robotic system based on AFM and human machine interaction interface for experiment verification

该系统以美国 Veeco 公司 Dimension 3100 为基础 ,集成了虚拟纳米手的纳米操控技术 ,系统的硬件组成包含 3 个部分: AFM 执行机构 ,增强现实系统与实时控制模块 ,分别通过 3 台计算机进行控制。AFM 执行机构主要进行纳米成像及纳米操作; 增强现实系统为操作者提供一个增强现实的环境; 实时控制模块运行在一个装有数据采集卡的实时控制计算机上 ,采集卡将电压信号直接输出到改造后的 AFM 控制器上驱动探针运动 ,因而通过实时控制系统 Linux 计算机可以实现探针的实时高速控制 ,满足虚拟纳米手策略高频驱动探针运动的需要。为了加强系统的人

机交互性及可操作性, 设计了虚拟纳米手操作监控界面。该界面可以依据被操作物的物理特性和操作目标, 提供多种虚拟手模式和轨迹运动参数, 从而为纳米推动定量操控在理论方法上提供了依据和实现策略。

3 虚拟纳米手操作策略与仿真

3.1 虚拟纳米手策略的理论基础

虚拟纳米手操作策略是针对操作对象的被动运动误差分布, 设计探针的作用参数, 以达到操作的稳定性, 因此, 必须通过建立纳米粒子的运动学模型, 实时确定操作中粒子的位置, 预测操作后粒子中心的位置, 从而设计探针作用参数, 使操作过程中粒子的误差分布在允许的范围内。

文献 [16] 对纳米粒子的运动情况进行了讨论, 根据对基底接触平面及探针作用平面的详细分析, 建立了纳米粒子的运动学模型。

在样本基底为均质介质的前提下, 可将探针作用下的粒子视为作匀速圆周运动的圆盘, 如图 3 所示。在粒子与基底的接触平面对粒子进行受力分析, 建立接触平面的摩擦力与力矩方程; 对探针作用平面进行受力分析, 建立推动平面的力与力矩方程, 根据粒子所受的力与力矩的平衡关系, 得到纳米粒子的运动学模型即表达式:

$$\int_{\pi/2 - \arcsin R/S}^{\pi/2 + \arcsin R/S} (f_{\theta} \sin \theta L_p \cos \theta_0 - M_{\theta}) d\theta = 0 \quad (1)$$

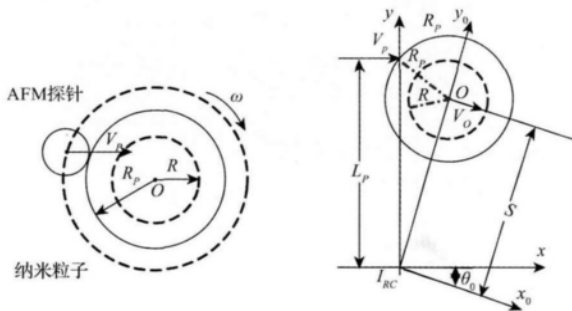


图 3 AFM 探针推动纳米粒子的运动学模型分析
Fig. 3 The kinematic model analysis of the AFM tip pushing the nanoparticle

通过数值分析方法对上述方程进行求解, 可得到变量 S 。根据圆周运动的特点, 可用式 (2) 描述探针推动速度 V_p 与粒子圆心运动速度 V_o 的关系:

$$\frac{V_p}{L_p} = \frac{V_o}{S} \quad (2)$$

通过粒子的运动时间即可确定操作后粒子所在的位置。参数说明及公式推导过程请参考文献 [16]。

3.2 虚拟纳米手推动策略

纳米操作中, 即使物体的运动学模型完全确定, 也会由于操作环境的不确定性导致操作结果存在误差, 且随单次操作时间的延长而加大, 直到下一次重新扫描才会修正。此外, AFM 的单探针只能对纳米粒子施加点式作用力, 容易在操作过程中使探针与粒子相脱离, 引起操作失败。

虚拟纳米手策略的中心思想是在不确定的操作环境下, 对 AFM 探针的作用点进行规划, 以高频驱动探针进行小步长推动, 使每步操作后粒子的位置误差始终在规定的范围内, 且误差逐渐减小。模拟多手指即多探针并行操作, 如图 4 所示。

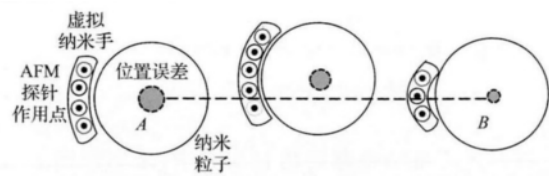


图 4 虚拟纳米手策略推动纳米粒子示意图
Fig. 4 The schematic diagram of the nanoparticle pushing using virtual nano-hand strategy

为了实现稳定操作, 规划 AFM 作用参数形成手形结构时必须满足收敛性, 即控制操作过程和结果误差始终在设计范围内。实验证明粒子初始位置的不确定性满足高斯分布, 故如果采用在纳米颗粒的两侧进行对称操作的策略, 即连续操作的探针作用点位于粒子中心的两侧, 且推动路径沿着粒子中心分布区域的边缘, 推动步长的设置应在运动学模型的基础上保证推动后最大误差不超过预定的允许值, 从而能够保证中心采样点始终在探针的一侧分布, 实现稳定的操作。在操作过程中可设置多个探针作用点及随误差分布的变化而改变作用步长来提高操作效率, 本文仅讨论稳定操作策略。应用纳米手操作策略能够实现纳米粒子的定量精确操作, 这不仅为基于纳米粒子的微纳器件装配提供新的技术手段和方法, 还将进一步促进基于 AFM 自动化监控作业模式的技术发展, 为并行化、批量化纳电子器件制备奠定基础, 对促进材料、信息及其他相关领域的发展具有重要的意义。

3.3 虚拟纳米手推动策略的仿真

为了实现虚拟纳米手操作策略, 必须依靠合适的数学工具对操作策略的效果进行描述。本研究采用的分析方法吸收了概率机器人学中关于粒子滤波器实现机器人实时定位和建图的思想, 利用其中的概率预测方法, 采用蒙特卡洛随机的样本粒子来描述纳米颗粒在任意时刻的位置分布状态。

为了进行操作策略的规划,首先要进行初始误差分布的标定。实验中对扫描范围为 $3.2 \mu\text{m}$ 的区域进行连续成像,如图 5 所示,以粒子 P_1 为参考点得到粒子 P_2 的中心位置分布情况。通过对实验数据进行统计,可以得出由温漂、成像像素限制等因素造成半径为 100 nm 的乳胶纳米颗粒的初始位置误差符合方差 $\sigma = 10 \text{ nm}$ 的高斯分布。

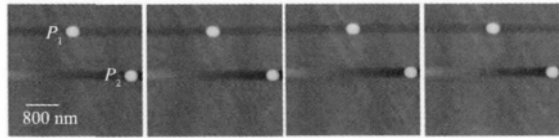


图 5 纳米粒子中心分布的标定
Fig. 5 The distribution of the nanoparticle centre calculated from thirty images

在纳米手推动策略的仿真实验中,采用蒙特卡洛方法来描述纳米粒子位置的分布,在已建立的粒子运动学模型的基础上,对 TOP 操作策略及 VNHS 操作策略进行评估。图 6(a) 用来描述纳米颗粒的初始位置分布情况,采样点数量为 500 个,每个采样点代表纳米粒子中心的可能位置。

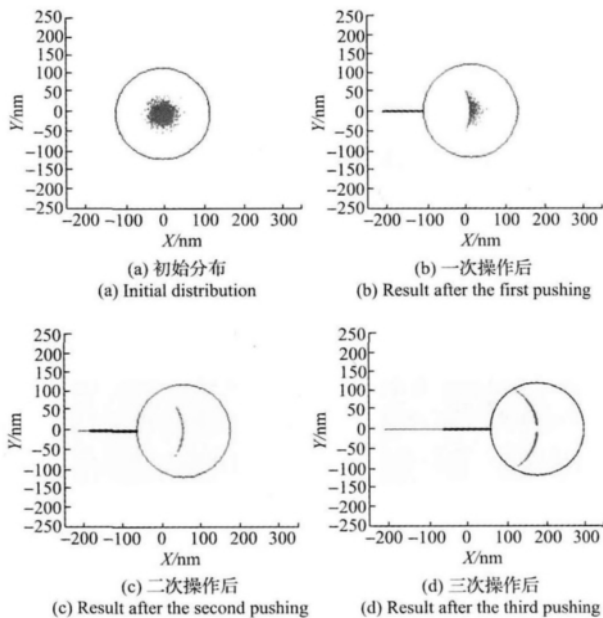


图 6 面向对象操作(TOP)的仿真结果
Fig. 6 The simulation result of target oriented pushing using the traditional strategy(pushing the NP center)

图 6(b)、(c)、(d) 为 TOP 操作策略即推动纳米粒子中心位置的仿真结果,黑色直线为探针从左至右的运动轨迹,且推动步长为 30 nm 。仿真结果看出,初次推动操

作后(图(b))粒子中心的概率分布不再是高斯分布,其原因是操作过程中一部分粒子点位置发生改变,并在探针的终止位置附近形成了半径为 R_p (探针半径)的圆弧,而一部分采样点由于推动步长较小的原因,与探针并未接触,保留在原位置不变。连续推动操作后(图(c)、(d))粒子中心的概率分布转化为弧线分布,且随推动操作而分为两部分,即粒子的概率分布范围是离散的,表明了 TOP 操作策略易出现不稳定的操作结果。

为了保证稳定操作,粒子中心的可能分布应始终在允许的范围内,根据高斯分布的 3σ 原则,约为 99.7% 的采样点均分布在该范围。因此, VNHS 操作策略的仿真中,稳定操作的纳米手策略设定为探针推动路径之间距离大于 $\pm 3\sigma$,并以 Z 型交替推动,故仿真中将对称作用点设置在距粒子中心点 $\pm 52 \text{ nm}$ 的位置,根据粒子运动学模型的计算,为保证推动后采样点均在 $\pm 3\sigma$ 的范围内将单次推动步长设置为 30 nm ,仿真结果如图 7 所示。

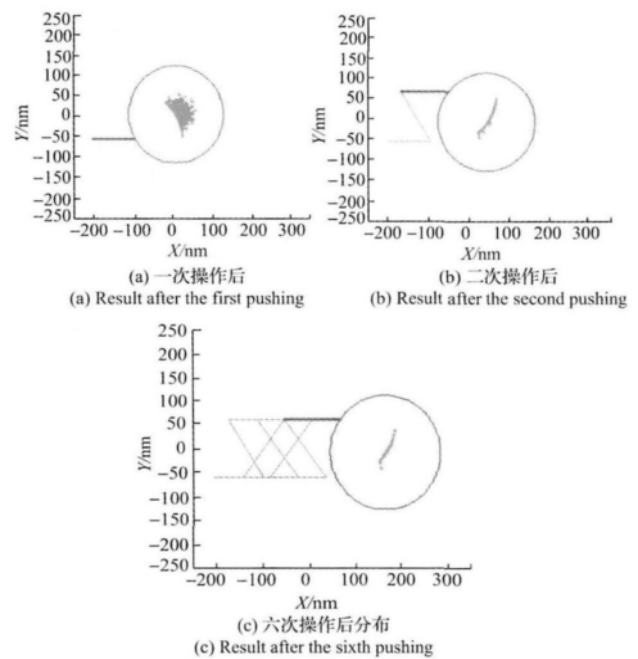


图 7 虚拟纳米手操作策略(VNHS)的仿真结果
Fig. 7 The simulation result of pushing using virtual nano-hand strategy

图 7(a) 为 VNHS 策略的初次推动结果,探针作用位置为粒子中心下方 52 nm ($> 3\sigma$) 处,图(b)为二次推动结果,探针作用位置为粒子中心上方 52 nm 处,两次推动后,采样点的分布迅速收敛为一维弧线。图(c)为交替推动 6 次后的仿真结果,采样点为一维弧线且采样点的分布明显减小。

由仿真结果可知, VNHS 策略的 3σ 原则能够保证探针每次推动都能够接触到纳米粒子,而采用 Z 字形交替

推动的方式能够保证粒子中心的可能位置始终在两个平行的操作路径之间,且采样点收敛,位置误差的分布逐渐减小,故可实现稳定的纳米操作。

4 实验验证

4.1 样本制备

将半径为 100 nm 的乳胶纳米小球溶液用去离子水进行稀释,取少许溶液滴在干净的 CD 基底上,氮气吹干后,静置 3 h 以上进行操作。

4.2 实验结果

本实验的平台为自组建的虚拟纳米手操作人机交互系统,探针为 MikroMasch 公司的 NSC15/AIBS。

为了与仿真结果进行对比,实验中 VNHS 操作策略的作用参数设置如下: AFM 探针的推动速度设定为 $1 \mu\text{m/s}$,推动作用点设置为距粒子中心 $\pm 40 \text{ nm}$ 的位置,推动步长为 30 nm,交替推动次数为 30 次。图 8 为 2 次实验结果,其中图(a)、(d)为操作前的图像,图(b)、(e)为操作后的图像,图(c)、(f)为叠加图像。

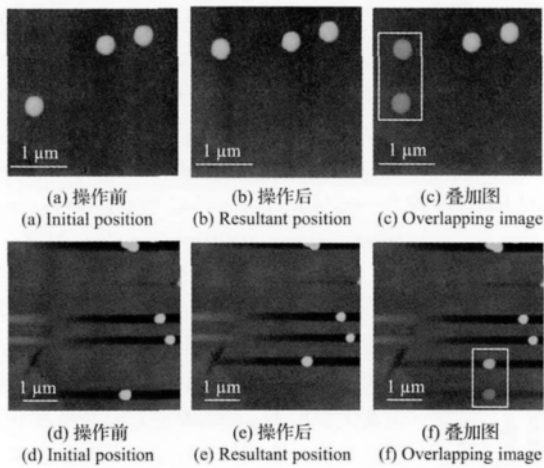


图 8 虚拟纳米手操作策略的实验结果
Fig. 8 The pushing experimental results of NP using nano-hand strategy

两次实验中,纳米粒子的垂直位移分别为 902 nm 和 916 nm,水平位移分别为 12 nm 和 19 nm,水平位移不同的原因在于两次实验的扫描区域尺寸不同,但两次实验结果的位置误差均未超过一个像素点。

为实现粒子垂直位移 $1 \mu\text{m}$ 的操作目的,将 10 次 TOP 操作和 VNHS 操作的实验结果进行比较,其中 TOP 操作的垂直位移数值差异较大,最大值为 875 nm, VNHS 操作的垂直位移均在 930 nm 以上,两种操作策略的水平位移误差对比结果如表 1 所示。

由实验对比结果可以看出, TOP 操作后存在较大的水平位移误差,基本在 2 个像素点以上(扫描图像的分辨

率均为 256×256),且随着扫描范围的增大,误差加大,其中第 9 次的误差达到 117 nm 超过了粒子半径,说明操作过程中粒子与探针已经脱离,而探针固有半径造成误差超过了 100 nm。应用 VNHS 操作策略进行长距离推动操作后,纳米粒子的水平位移很小,基本控制在 1 个像素点的范围内,且第 3 次和第 8 次的误差为 0,说明了虚拟纳米手操作策略的稳定性。

表 1 TOP 与 VNHS 策略的实验结果比较

Table 1 Comparison of the experimental results between the TOP and VNHS strategies

实验次数	扫描尺寸/ $\mu\text{m} \times \mu\text{m}$	TOP/nm	VNHS/nm
1	3.2×3.2	25	12.5
2	3.2×3.2	25	12.5
3	3.2×3.2	37.5	0
4	3.2×3.2	12.5	12.5
5	3.2×3.2	50	0
6	5.0×5.0	19.5	19.5
7	5.0×5.0	97.5	39
8	5.0×5.0	78	0
9	5.0×5.0	117	19.5
10	5.0×5.0	78	19.5

5 结论

纳米装配操作过程中的不确定性造成缺乏有效的方法实现纳米粒子的稳定、精确操作仍然是纳米结构和纳米器件制造过程中面临的主要问题之一。本文针对纳米操作中的不确定性问题提出了虚拟纳米手操作策略。该策略在已建立的纳米粒子运动学模型基础上,采用蒙特卡洛方法描述纳米粒子初始位置的不确定性分布,并据此进行探针作用参数的规划,模拟多探针并行操作的效果,实现了纳米粒子的稳定操作。仿真结果与实验结果验证了该操作策略的有效性。虚拟纳米手操作策略通过探针多次组合推动,实现纳米颗粒长距离推动过程及结果的误差范围控制。由于操作过程中不采用局部扫描操作,减少了耗时的检测环节,提高了纳米操作的有效性。

参考文献

- [1] WU S, FU X, HU X D, et al. Manipulation and behavior modeling of one-dimensional nanomaterials on a structured surface [J]. Applied Surface Science, 2010, 256(14): 4738-4744.
- [2] XU K, WU CH D, TIAN X J, et al. Single-walled carbon nanotube-based gas sensors for NO_2 detection [J]. Integrated Ferroelectrics, 2012, 135(1): 132-137.
- [3] REQUICHA A A G, ARBUCKLE D J, MOKABERI B, et al. Algorithms and software for nanomanipulation with atomic force microscopes [J]. The International Journal of Robotics Research, 2009, 28(4): 512-522.

- [4] 袁帅 董再励 缪磊等. 基于数学形态学方法的 AFM 探针建模研究[J]. 仪器仪表学报 2010 31(5): 1102-1107.
YUAN SH ,DONG Z L ,MIAO L ,et al. AFM tip estimation based on mathematical morphology [J]. Chinese Journal of Scientific Instrument 2010 31(5): 1102-1107.
- [5] 袁帅 董再励 缪磊等. 基于精确探针模型的 AFM 图像重构研究[J]. 仪器仪表学报 2009 30(6): 1117-1122.
YUAN SH ,DONG Z L ,MIAO L ,et al. AFM image reconstruction based on accurate tip model [J]. Chinese Journal of Scientific Instrument 2009 30(6): 1117-1122.
- [6] LI G Y ,XI N ,YU M M ,et al. Development of augmented reality system for AFM-based nanomanipulation [J]. IEEE/ASME Transactions on Mechatronics 2004 9(2): 358-365.
- [7] LI G Y ,XI N ,CHEN H P ,et al. "Videolized" atomic force microscopy for interactive nanomanipulation and nanoassembly [J]. IEEE Transactions on Nanotechnology , 2005 4(5): 605-615.
- [8] CHEN H P ,XI N ,LI G Y. CAD-guided automated nano-assembly using atomic force microscopy-based nanorobots [J]. IEEE Transactions on Automatic Science and Engineering 2006 3(3): 208-217.
- [9] LIU L Q ,LUO Y L ,XI N ,et al. Sensor referenced real-time videolization of atomic force microscopy for nanomanipulations [J]. IEEE/ASME Transactions on Mechatronics 2008 13(1): 76-85.
- [10] MOKABERI B ,REQUICHA A A G. Drift compensation or automatic nanomanipulation with scanning probe microscopes [J]. IEEE Transactions on Automation Science and Engineering 2006 3(3): 199-207.
- [11] ZHAO W ,XU K M ,QIAN X P ,et al. Tip based nanomanipulation through successive directional push [J]. Journal of Manufacturing Science and Engineering , 2010 , 132: 030909.
- [12] XU K M ,KALANTARI A ,QIAN X P. Efficient AFM based nanoparticle manipulation via sequential parallel pushing [J]. IEEE Transactions on Nanotechnology , 2012 ,11(4): 666-675.
- [13] MOKABERI B ,REQUICHA A A G. Compensation of scanner creep and hysteresis for AFM nanomanipulation [J]. IEEE Transactions on Automation Science and Engineering , 2008 5(2): 197-206.
- [14] RAO A ,GNECCO E ,MARCHETTO D ,et al. The analytical relations between particles and probe trajectories in atomic force microscope nanomanipulation [J]. Nanotechnology 2009 20(11): 115706.
- [15] XU Z ,LI X ,SUTTON M. A ,et al. Drift and spatial distortion elimination in atomic force microscopy images by the digital image correlation technique [J]. J. Strain Analysis , 2008 43(8): 729-743.
- [16] 侯静 吴成东 刘连庆等. 基于 AFM 推动的纳米粒子运动学模型研究 [J]. 仪器仪表学报 ,2011 ,32(8): 1851-1857.
HOU J ,WU CH D ,LIU L Q ,et al. Research on kinematics model of nanoparticle based on AFM pushing [J]. Chinese Journal of Scientific Instrument ,2011 ,32(8): 1851-1857.

作者简介



侯静, 分别于 2001 年、2004 年在沈阳建筑大学获得学士、硕士学位, 现为东北大学信息科学与工程学院博士研究生, 主要研究方向为 AFM 机器人化纳米操作方法研究。

E-mail: bluerainhj@163.com

Hou Jing received B. Sc. degree in 2001 and M. Sc. degree in 2004 both from Shenyang Jianzhu University, respectively. Now she is working toward Ph. D. degree in College of Information Science and Engineering, Northeastern University. She majors in robotic nanomanipulation based on AFM.



吴成东, 1983 年于沈阳建筑大学获得学士学位, 1988 年于清华大学获得自动控制理论与应用专业硕士学位, 1994 年于东北大学获得工业自动化专业博士学位, 现为东北大学教授, 主要研究方向为模式识别、智能控制及微纳米操控系统与制造技术。

E-mail: wuchengdong@ise.neu.edu.cn

Wu Chengdong received B. Sc. degree in electrical automation from University of Shenyang Architectural and Civil Engineering in 1983, M. Sc. degree in control theory and application from Tsinghua University in 1988, and Ph. D. degree in industrial automation from Northeastern University in 1994. Now he is a professor in Northeastern University, Shenyang, China. He majors in pattern recognition, intelligent control, micro and nano operation system and manufacturing technology.