原子力显微镜管式扫描器运动学建模与误差分析*

田孝军[1,2]　王越超[1]　董再励[1]　席　宁[1]
[1](中国科学院沈阳自动化研究所机器人学重点实验室　沈阳　110016)
[2](辽宁工学院　锦州　121000)

摘要　针对样本扫描模式原子力显微镜, 对其管式扫描器-样本-探针系统进行了运动学分析, 建立了该系统的运动学模型, 该模型表明: 对于给定原子力显微镜扫描器, 样本上与探针接触点的横向和纵向位移取决于探针尖端相对于扫描管轴心的偏置量、所加电压(或名义扫描范围)及样本厚度。据此模型, 对由于弯曲运动模式所产生的两种重要误差—交叉耦合误差及扫描范围误差进行了定量分析, 分析表明: 扫描范围误差主要受样本厚度及名义扫描范围影响, 而 Z 向交叉耦合误差主要受探针偏置量及名义扫描范围影响, 实验验证了所建立的运动学模型和误差计算公式的正确性; 另外, 还提出了相应的减小误差的方法。

关键词　样本扫描模式原子力显微镜　管式扫描器　运动学模型　扫描范围误差　交叉耦合误差
中图分类号　TH742　TP215　**文献标识码**　A　**国家标准学科分类代码**　510.8040

Kinematics Modeling and Error Analysis of AFM Tube Scanner

Tian Xiaojun[1,2]　Wang Yuechao[1]　Dong Zaili[1]　Xi Ning[1]
[1](*Robotics Laboratory, Shenyang Institute of Automation, Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110016, China*)
[2](*Liaoning Institute of Technology, Jinzhou 121000, China*)

Abstract　For sample-scanning atomic force microscope (AFM), the kinematics of tube scanner-sample-probe system is analyzed and the kinematics model is proposed. The model shows that transverse and longitudinal displacement at the point on sample touched by probe tip is dependent on probe tip offset to scanner axes, applied voltage or nominal scanning size and sample thickness. According to the model, two important errors caused by bow motion are quantitatively analyzed, which demonstrates scanning size error greatly affected by sample thickness and nominal scanning size, while Z axis cross-coupling error greatly affected by probe tip offset and nominal scanning size. Experiments verify the kinematics model and error calculation formulas. In addition, some methods are presented to minimize the errors.

Key words　Sample-scanning　AFM　Tube scanner　Kinematics model　Scanning size error　Gross-coupling error

1　引　　言

自 1986 年 G. Binnig 等发明原子力显微镜[1](AFM, atomic force microscope)以来, 它已成为纳米状态下对样本成像的标准工具, 近年来, AFM 已不仅用于对样本的高精度成像, 也越来越多的应用到了纳米加工和操作中。AFM 可以分为探针扫描模式和样本扫描模式两种, AFM 的扫描运动执行器一般采用单管式扫描器[2], 样本扫描模式 AFM 的单管式扫描器常规结构如图 1 所示。

管式扫描器主体部分(中间银色部分)为一中空的圆柱状压电陶瓷管, 压电陶瓷管下端固定于基座上, 上端为自由端, 其上装有样本台, 扫描观测用的样本置于

* 本文于 2004 年 2 月收到, 系国家 863 计划(2002AA422210)资助项目。

© 1995-2005 Tsinghua Tongfang Optical Disc Co., Ltd. All rights reserved.

样本台上。陶瓷管的内外壁都镀有金属膜, 外壁均匀对称地沿轴向刻为 4 个电极, 其中相对的两个电极成对使用, 施加双极性电压, 压电陶瓷管产生弯曲[2], 从而实现水平方向的扫描运动; 对压电陶瓷管的内壁施加电压, 产生 Z 向运动, 由于上端自由, 陶瓷管运动时带动其上的样本运动。

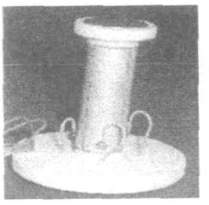


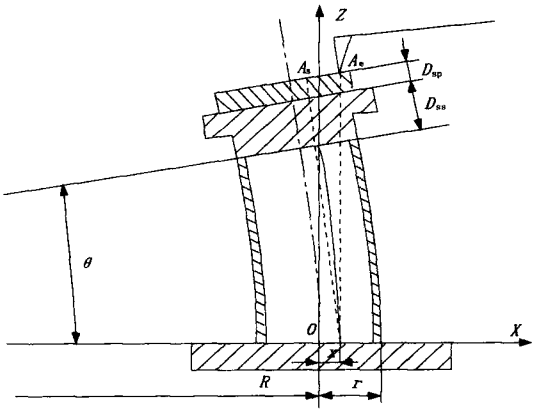
图 1　样本扫描模式 AFM 的单管式扫描器

对样本扫描模式 AFM 而言, 由于管式扫描器的运动模式为弯曲运动, 在对样本扫描成像或纳米操作过程中会产生两重要误差: 交叉耦合误差和扫描范围误差, 这两项误差严重影响了对成像的量化分析及纳米操作时探针定位与运动的精确性。对于 AFM 测量误差, 尤其是对由于压电陶瓷固有特性如非线性、滞后等引起的误差, 国内外许多学者进行了大量研究并提出许多图像校准或非线性校正方法, 而对于由扫描器结构和运动模式引起的误差研究很少。其中, 有学者研究了成像时样本厚度对云母原子间距的影响, 并提出将扫描管长度作为修正因子对成像误差进行修正[3], 另有学者主要针对探针扫描模式 SPM 的交叉耦合误差、非正交误差等进行了研究[4]。

对于样本扫描模式 AFM, 由于其扫描器结构及扫描器运动时带动的部件与探针扫描模式 AFM 不同, 在研究中需要考虑的影响因素也大不相同, 其中必须考虑前面学者都没有考虑的一个重要影响因素: 探针尖端相对于扫描管轴心的偏置量。本文针对样本扫描模式 AFM, 从建立管式扫描器-样本-探针系统运动学模型入手, 在理论和实验上对由此模型得到的扫描范围误差与交叉耦合误差进行了定量分析研究, 并提出了相应减少误差的措施。

2　管式扫描器运动学建模

针对图 1 所示样本扫描模式 AFM 的单管式压电陶瓷扫描器, 由于探针位置固定不动, 调节扫描器基座位置, 改变扫描器在水平面的位置对样本上不同区域成像或操作时, 探针尖端相对于扫描器轴心的偏置量会随之改变, 并且更换不同的探针此偏置量也随之改变, 在分析时必须考虑此偏置量对运动的影响。当在扫描器 X 方向施加极性相反的电压时, 会在垂直面内 (XOZ 面) 产生弯曲运动, 从而带动样本运动, 此时样本的运动为平动加上转动, 因此样品台上各点的位移各不相同, 取 XOZ 运动平面, 扫描器-样本-探针系统在此平面的运动如图 2 所示。



θ 所夹部分为压电陶瓷扫描管　D_{ss} 对应样本台　D_{sp} 对应样本

图 2　样本扫描模式 AFM 管式扫描器-样本-探针系统运动学模型

若扫描管材质均匀、结构对称, 在 XOZ 平面上以扫描管轴线为对称轴, 左右两侧伸长与缩短量相同, 可视扫描管弯曲为圆弧形弯曲[5]。此时, 根据几何关系可得:

$$\begin{cases} (R + r)\theta = L + \Delta L \\ (R - r)\theta = L - \Delta L \end{cases} \tag{1}$$

式中: r 为扫描管外半径, R 为扫描管弯曲所对应的曲率半径, θ 为扫描管弯曲所对应的圆心角, L 为扫描管初始长度, ΔL 为在扫描管的 X 向两极加极性相反的电压 U_x 时扫描管的伸缩量。

此时扫描管伸缩量[6]为:

$$\Delta L = E d_{31} L = \frac{d_{31} L}{t} U_x \tag{2}$$

式中: $E = U_x / t$ 为壁厚方向的电场强度, U_x 为扫描管内外壁电压差, t 为扫描管壁厚, d_{31} 为扫描管轴向压电常数。

由式(1)、(2)可得扫描管弯曲所对应圆心角为:

$$\theta = \frac{L}{R} = \frac{\Delta L}{r} = \frac{d_{31} L}{tr} U_x \tag{3}$$

在扫描管进行弯曲运动前(完成探针逼近后), 探针与样本初始接触点的 X 向坐标(探针尖端相对于扫描管轴心的偏置量)为 x, 其 Z 向坐标为 $L + D_{ss} + D_{sp}$。当扫描管向左边弯曲后, 对于图 2 所示运动学模型, 探针与样本的初始接触点运动到点 A_s, 则样本上该点的位移为:

© 1995-2005 Tsinghua Tongfang Optical Disc Co., Ltd. All rights reserved.

$$\begin{cases} d_x = (R + x)(1 - \cos\theta) + (D_{ss} + D_{sp})\sin\theta \\ d_z = ((R + x)\sin\theta - L) + (D_{ss} + D_{sp})(\cos\theta - 1) \end{cases} \quad (4)$$

此时，探针尖端与样本接触点A_e的X向坐标仍然为x，Z向坐标为：

$$Z_{Ae} = (R + x)\tan\theta + (D_{ss} + D_{sp})/\cos\theta \quad (5)$$

则样本相对于探针运动而使探针扫过的右边区域的大小L_{rss}（即线段A_1A_e的长度）为：

$$L_{rss} = ((R + x)(1 - \cos\theta) + (D_{ss} + D_{sp})\sin\theta)/\cos\theta \quad (6)$$

同理，当扫描管向右边弯曲时探针扫过的左边区域的大小L_{lss}为：

$$L_{lss} = ((R - x)(1 - \cos\theta) + (D_{ss} + D_{sp})\sin\theta/\cos\theta \quad (7)$$

在扫描过程中，扫描管左右弯曲实现对整个扫描范围的扫描，整个扫描范围大小L_{ss}为：

$$L_{ss} = L_{rss} + L_{lss} = 2[R(1 - \cos\theta) + (D_{ss} + D_{sp})\sin\theta]/\cos\theta \quad (8)$$

由式(3)、式(8)可得：

$$L_{ss} = 2[\frac{L}{\theta}(1 - \cos\theta) + (D_{ss} + D_{sp})\sin\theta]/\cos\theta \quad (9)$$

可以看出，扫描范围L_{ss}与探针偏置量x无关，当选定扫描管后，扫描管初始长度L和样本台厚度D_{ss}一定，则扫描范围L_{ss}只与扫描管弯曲所对应的圆心角θ和样本厚度D_{sp}有关。

进一步分析，当压电陶瓷管在电场作用下沿轴向伸长时，管壁厚度也会发生变化，壁厚变化量为：$\Delta t = d_{33}U_x$，其中d_{33}为扫描管壁厚方向的压电常数，对于管式扫描器，d_{33}为亚纳米/伏[6]，U_x为零到几百伏，则陶瓷管的壁厚变化量Δt一般为亚微米级，而扫描管厚度t为毫米或亚毫米级，则壁厚变化量Δt与扫描管壁厚t之比为万分之一到千分之一，这样在进行运动学分析时可以忽略壁厚变化的影响，将壁厚t视为常量。对于给定扫描管，r、L、t及d_{31}都是常数，由式(2)、(3)可知，扫描管伸缩量ΔL和弯曲所对应的圆心角θ只与所加电压U_x有关。

此时，将式(3)代入式(4)可得：

$$\begin{cases} d_x = (\frac{tr}{d_{31}U_x} + x)(1 - \cos(\frac{d_{31}L}{tr}U_x)) + (D_{ss} + D_{sp})\sin(\frac{d_{31}L}{tr}U_x) \\ d_z = ((\frac{tr}{d_{31}U_x} + x)\sin(\frac{d_{31}L}{tr}U_x) - L) + (D_{ss} + D_{sp})(\cos(\frac{d_{31}L}{tr}U_x) - 1) \end{cases} \quad (10)$$

由式(10)可见，对于给定AFM，其扫描管几何参数及压电常数都为常数，扫描管运动时探针与样本接触点的横向或纵向位移取决于所加电压U_x、探针偏置量x及样本厚度D_{sp}。

3 扫描范围误差与交叉耦合误差

3.1 扫描范围误差

在对样本进行扫描成像之前，通过标定光栅对AFM进行校准，校准时所采用光栅的厚度为名义样本厚度D_{nsp}，校准后扫描范围为名义扫描范围（即扫描软件界面上设置值），由式(11)可知名义扫描范围L_{nss}为：

$$L_{nss} = 2(\frac{L}{\theta}(1 - \cos\theta) + (D_{ss} + D_{nsp})\sin\theta)/\cos\theta \quad (11)$$

对于商用AFM扫描器，其扫描管初始长度L、样本台厚度D_{ss}及样本名义厚度D_{nsp}为定值，则名义扫描范围L_{nss}与扫描管弯曲所对应的圆心角θ（或X向电压U_x）一一对应。

当扫描的样本厚度与名义样本厚度不同时，实际扫描范围与名义扫描范围之间会存在误差，此误差为扫描范围误差，由式(9)、(11)可得扫描范围误差为：

$$\Delta L_{ss} = L_{ss} - L_{nss} = 2(D_{sp} - D_{nsp})\tan\theta \quad (12)$$

可以看出，对于商用SPM扫描器，校准后其名义样本厚度D_{nsp}为给定值，扫描范围误差ΔL_{ss}与样本厚度D_{sp}、名义扫描范围L_{nss}（由于它与圆心角θ一一对应）有关。取扫描管初始长度为52mm，样本台厚度为5.5mm，名义样本厚度为2mm，当名义扫描范围为从10μm到30μm变化，且样本厚度从2mm变化到10mm时，扫描范围误差随样本厚度及名义扫描范围的变化关系如图3（仿真图）所示。

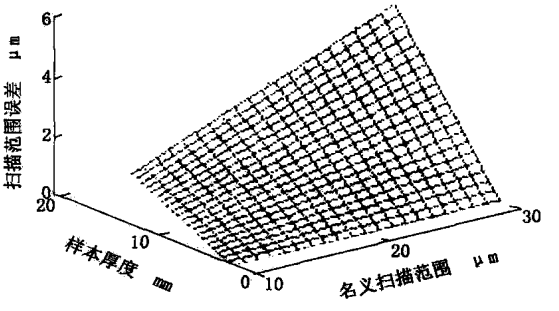


图3 扫描范围误差曲面

3.2 交叉耦合误差

3.2.1 X-Y向运动在Z向产生的交叉耦合误差

如图2所示，探针位于扫描管轴心的右侧，当扫描管向左边弯曲时，探针相对于样本向右运动，运动到扫

© 1995-2005 Tsinghua Tongfang Optical Disc Co., Ltd. All rights reserved.

描范围的右边界时, 产生的 Z 向交叉耦合误差由式(3)、(5)推得:

$$\Delta Z_{rc} = z_{A_x} - (L + D_{ss} + D_{sp})$$

$$= [(\frac{L}{\theta} + x)\tan\theta - L] + [(D_{ss} + D_{sp})(\frac{1}{\cos\theta} - 1)] \quad (13)$$

对于商用 AFM 扫描器, 扫描管初始长度 L、样本台厚度 D_{sp} 一定, Z 向交叉耦合误差 ΔZ_{rc} 与探针偏置量 x、样本厚度 D_{sp} 及名义扫描范围 L_{nss} 有关。取扫描管初始长度为 52mm, 样本台厚度为 4mm, 名义样本厚度为 2mm, 当名义扫描范围从 10μm 到 30μm 变化, 且探针偏置量在 0～1mm 之间变化时, Z 向交叉耦合误差随探针偏置量及名义扫描范围的变化关系如图 4(仿真图)所示。

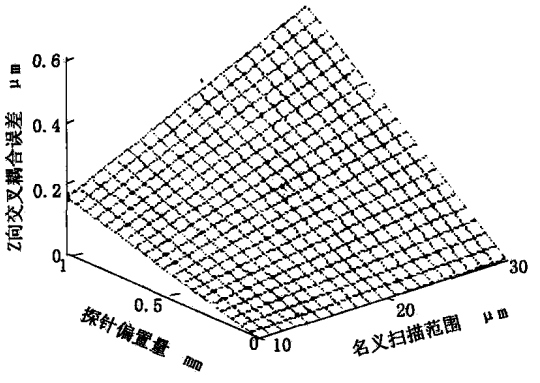


图 4　Z 向交叉耦合误差曲面

对于特殊情况, 当探针偏置量为零, Z 向交叉耦合误差随名义扫描范围的变化如图 5(仿真图)所示。可

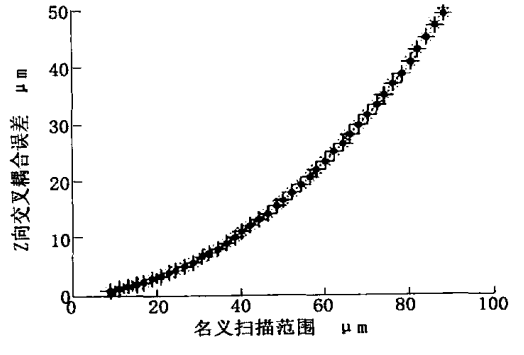


图 5　Z 向交叉耦合误差曲线(探针偏置量为零时)

以看出, 当探针偏置量为零时, 名义扫描范围越大, 由弯曲效应带来的 Z 向交叉耦合就越大, 但与探针偏置引起的误差相比, 要小一个数量级, 而且在扫描范围小时(如小于 30μm), Z 向耦合误差很小。

3.2.2　Z 向运动在 X-Y 向产生的交叉耦合误差

在扫描过程中, 当进行 X-Y 扫描的同时, 若在扫描管内壁叠加上一个电压 U_z, 此时产生的额外轴向伸缩量为:

$$\Delta L_z = \frac{d_{31}L}{t}U_z \quad (14)$$

由于此时扫描管弯曲, 扫描管的轴向伸缩会在 X 向附加一个耦合误差, 此耦合误差计算公式为:

$$\Delta X_{zc} = \Delta L_z \sin\theta \quad (15)$$

在实际扫描过程中, 扫描管最大伸缩量 ΔL_z 为几微米, 即使在最大扫描范围时扫描管弯曲对应的圆心角 θ 仍然很小(为 0.0001～0.001rad), 由式(15)可得, 扫描管的 Z 向伸缩运动产生的 X 向交叉耦合误差 ΔX_{zc} 就很小(为亚纳米级), 可以忽略不计。

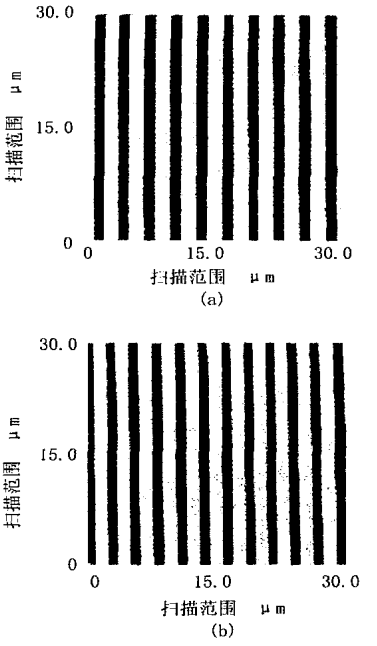


图 6　实测扫描范围

4　实验与分析

本实验采用本原纳米仪器公司 CSPM 2000wet 型 SPM, 扫描管初始长度为 52mm, 样本台厚度为 4mm, 校准后名义样本厚度为 2mm, 名义扫描范围为从 0 到 30μm。

4.1　扫描范围误差及分析

将标定光栅(TGZ02, Mickomasch 公司)作为样本, 其台阶间距 3μm, 当名义扫描范围为 30μm 时, 将样本厚度由 2mm 加厚为 10mm 时, 测得扫描范围的变化如图 6 所示。

由图 6 中(a)、(b)图可以看出, 当样本厚度从 2mm 增加到 10mm 时, 实际扫描范围变大(扫描的台

© 1995-2005 Tsinghua Tongfang Optical Disc Co., Ltd. All rights reserved.

阶数增加)。取名义扫描范围为30μm,通过调节样本厚度,测得实际扫描范围变化如表1所示。另外,实验还得到:当样本厚度及名义扫描范围不变时,改变探针偏置量的大小,扫描范围并不改变,这样也就验证了扫描范围与探针偏置量无关。

表1 扫描范围(理论值与实测值)

基片厚度 (mm)	扫描范围实测值 (μm)	扫描范围理论值 (μm)
2	30.0	30.000
4	31.0	31.034
6	31.9	32.068
8	33.2	33.103
10	34.1	34.137

可以看出,当实测样本厚度与名义样本厚度一致时,实际扫描范围与名义扫描范围基本相同。当厚度不一致时,实际扫描范围受样本厚度(及名义扫描范围)影响很大。所以,在实验中应尽量保证实测样本厚度与名义样本厚度一致,可以通过增加或减少样本厚度的方法来实现。对于一些特殊的很厚又不允许将厚度减少的样本,可以利用式(12)对测得扫描范围进行补偿来获得真实扫描范围。

4.2 Z向交叉耦合误差及分析

扫描时,容易将探针偏置量预先调节在1mm范围内,对AFM经过校准后,针对Mikromasch公司的Z向标定光栅TGZ02,由于其各台阶的高度误差很小(1.5nm),台阶面可视为平面。扫描过程中不隔直,名义扫描范围为30μm,当探针偏置量0.5mm时测得Z向交叉耦合误差如图7所示(剖面分析图(b)还反映了压电陶瓷固有的滞后与蠕变特性的影响)。

当样本厚度等于名义样本厚度时,实际扫描范围与名义扫描范围相同,取扫描范围为30μm,测得Z向交叉耦合误差随探针偏置量的变化如表2所示。

表2 Z向交叉耦合误差(理论值与实测值)

探针偏置量x (mm)	Z向交叉耦合误差实测值(nm)	Z向交叉耦合误差理论值(nm)
-0.5	-261	-253
-0.25	-119	-124
0	9	5
+0.25	130	134
+0.5	250	263

可以看出,实测值与理论值符合得较好。当探针偏置量为0且扫描范围小时(30μm以内),Z向交叉耦合误差很小;在探针偏置量不为0的情况下,Z向交叉耦合误差随扫描范围和探针偏置量的变化影响很大,而随样本厚度变化很小(可忽略不计),扫描范围和探针偏置量越大,Z向交叉耦合误差越大。

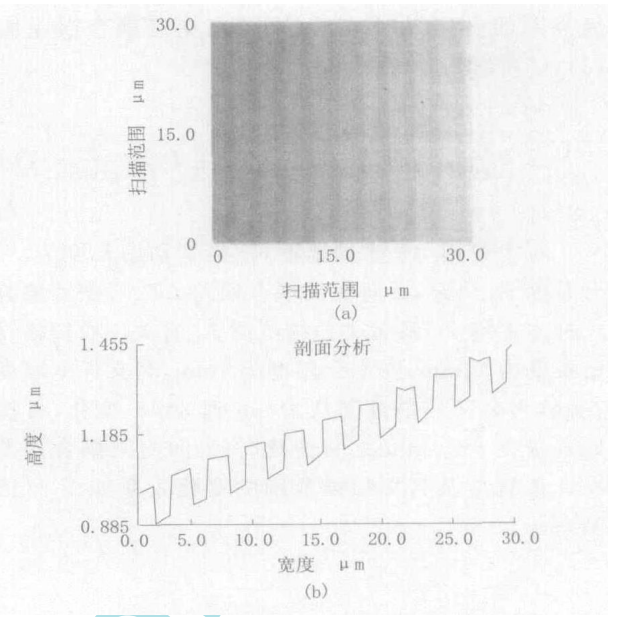


图7 实测Z向交叉耦合误差

当然,在成像时可以通过图像后处理的方法来消除探针偏置量带来的Z向交叉耦合误差,但在扫描管的实际运动中,它带来的Z向交叉耦合误差仍然存在,在进行基于AFM的纳米操作时,应予以消除,可以首先通过调节探针偏置为0的方法来消除。具体方法为:调节扫描管基座的水平位置,从而调节探针对扫描管轴心偏置量的大小,直到得到的扫描图出现类似中间低两边高的对称凹曲面图,此时样本上探针的初始接触点(即扫描区域的中心)位于扫描管的轴心,即探针偏置为0,这样就消除探针偏置带来的Z向误差。

5 结 论

本文针对样本扫描模式AFM,对管式扫描器进行了运动学建模,据此模型对扫描范围误差与交叉耦合误差进行了定量分析。根据分析可以得出:

对于商业化的AFM产品,由于用户无法对其扫描器进行结构改造,扫描范围误差和交叉耦合误差可以通过减小扫描范围等方法来加以减小。另外,对于要求扫描范围较大的场合:(1)对于扫描范围误差,可尽量让样本厚度与名义样本厚度相同;对于厚度无法改变而又要求扫描范围较大的场合,可以根据上述误差计算公式来进行补偿;(2)对于交叉耦合误差,扫描成像时可以采用图像后处理方法来去除探针偏置带来的影响,在基于AFM的操作与加工时,可首先调节探针偏置量为零,并利用上述公式计算出误差,在规划时进行补偿。

© 1995-2005 Tsinghua Tongfang Optical Disc Co., Ltd. All rights reserved.

总之, 交叉耦合误差及扫描范围误差对AFM 扫描成像和基于AFM 的纳米操作与加工的精度影响都很大, 通过采用上述方法可大大降低这两项误差的影响, 从而提高AFM 的测量和操作加工精度。

参考文献

1 G. Binning, C. F. Quate, C. Gerber. Atomic force microscope. Physical Review Letters, 1986, 56(9): 930～933.

2 G. Binnig, D. P. E. Smith. Single-tube three-dimensional scanner for scanning tunneling microscopy. Review of Scientific Instruments, 1986, 57(8): 1688～1689.

3 D. Snetivy, G. J. Vancso. Distance measurements by atomic force microscopy on the angstrom scale. The effect of the specimen height. Langmuir, 1993, 9(9): 2253～2254.

4 刘安伟, 胡小唐, 张国雄. 扫描探针显微镜单管式结构误差的研究. 仪器仪表学报, 1999, 20(1): 45～48.

5 C. Wei, H. H. Zhang, L. Tao, W. J. Li, H. M. Shi. A circular arc bending model of piezoelectric tube scanners. Review of Scientific Instruments, 1996, 67(6): 2286～2288.

6 J. A. Gallego-Juarez. Piezoelectric ceramics and ultrasonic transducers. Journal of Physics E: Scientific Instruments, 1989, 22: 804～816.

作者简介

田孝军　1975 年生　男　博士生　机械与电子工程专业研究方向为机器人学与纳米操作

E-mail: xjtian@sia.cn

(上接第 904 页)

(2) 在试验前, 检查或调整一下应变仪的零点值, 以确保应变仪有足够宽的应变参数测量范围。

对于正转换系数 K_P 的获得, 可以采用实时监测的方法获得, 也可在系统运行的初始阶段获得, 这取决于系统压力的控制精度。

参考文献

1 宗孔德, 胡广书. 数字信号处理. 北京: 清华大学出版社, 1988.

2 张伟, 等. 工程力学. 郑州: 郑州大学出版社, 1988.

3 徐从裕. 随机采样法求解周期信号精确值的原理和方法. 电子测量与仪器学报, 2003, 17(2): 61～64.

作者简介

徐从裕　男　1960 年生　高级工程师　在职博士生　研究方向为测试计量技术及仪器

(上接第 912 页)

8 Ho I, Jin-Chern Lin. Generating test cases for real-time software by time Petri nets model. Test Symposium, 1999, (ATS '99) Proceedings, Eighth Asian, 1999. 295～300.

作者简介

詹惠琴　女　1963 年生　副教授　博士　研究方向为测试计量技术及仪器

E-mail: zhqcec@163.com

© 1995-2005 Tsinghua Tongfang Optical Disc Co., Ltd. All rights reserved.