

## YYYY社社長のご意向

(1) バイオ・ソフトマテリアル用AFMシミュレータの開発に力を入れるべきである。これは、バイオ・ソフトマテリアル研究用AFM実験装置の販売台数が、近年、堅調を保っているからである。

- 液中環境下でのカンチレバーの振動問題の取り扱い
- 粘弾性接触解析機能の充実
- マクロスケールのソルバーとして開発すべきである

上記の事項は、LiqAFMで対応済みである。特に、液中環境下でのカンチレバーの探針を調べるソルバーは完成されているとあって良い。また、粘弾性接触解析機能も出来上がっている。従って、この課題については、ここで、開発をいったん終了として良い。

(2) 古典電磁気学で調べる範囲で良いので、KPFM像シミュレーション、分極した試料の分析を実現すべきである。試料としては、たんぱく質のような巨大な分子を想定している。

上記の事項は、macroKPFMで対応済みである。分極した水分子のAFMシミュレーション画像は、macroKPFM, FemAFMのDLVO理論機能を使うことで対応済みである。従って、この課題については、ここで、開発をいったん終了として良い等。

ただし、macroKPFMについて、次の問題が残されている。macroKPFMで使用する試料形状の境界要素データは、GeoAFMの結果を元にして作られる。表面形状が複雑に入り組んだ境界要素データでは、macroKPFMが計算エラーを出す傾向がある。この問題は、早急に解決しなくてはならない問題ではないが、時機を見て対応すること。

(3) スピン偏極STMのシミュレーションの開発について検討してみる価値はある。しかし、この課題に取り組むのは、当分、先で良い。これは、半導体・無機材料研究用のSTM実験装置の販売台数が、近年、急激に落ち込んでいるからである。



DFTBソルバーによる、スピン偏極STMシミュレータの開発に関しては、基本仕様書を作成した段階でストップしている。この開発を再開するのは、ソフト・バイオマテリアル用AFMシミュレータの開発が完了してからでも、遅くないと思われる。従って、この課題は後回しにして良い。

(4) 密度汎関数法ソルバーDFTBとPHASE/Oとの連携についてはあるが、この機能を必要とする研究者の数は多くないと考えられる。その理由は、現在、数を増しているバイオ・ソフトマテリアルAFM実験装置ユーザーは、PHASE/Oとの連携を、あまり必要と考えないはずだからである。従って、この課題に取り組むのは、当分先で良い。



DFTBソルバーとPHASE/Oとの連携は、途中までで停止している。DFTBソルバーで原子構造の形状データをcube形式で出力するようにしたが、このデータをPHASE/Oが受け付けるかどうか確認していない。PHASE/O開発者サイドから、シリコン結晶に関する形状データの提供を受ける予定であったが、諸般の事情により実現していない。この開発を再開するのは、ソフト・バイオマテリアル用AFMシミュレータの開発が完了してからでも、遅くないと思われる。従って、この課題は後回しにして良い。

## 株式会社XXXX訪問纏めから(2017年10月20日)

株式会社XXXXでは、 $\mu\text{m}$ オーダーのKPFM観察、誘電率、分極など、様々な試料・探針の電気特性に興味を持っている。例えば、金属基板に試料を乗せ、探針でSPM観察する際、探針に3から4個の水分子が付着した場合の影響について、興味を持っている。



この問題に関しては、macroKPFMソルバー、DLVO理論を考慮したmacroKPFMソルバー、DLVO理論とファンデルワールス力を考慮したmacroKPFMソルバー、DLVO理論を考慮したFemAFMソルバーで対応済みである。基板上に吸着した水分子も、基板データ上に正負の対の電荷を置いて分極したモーメントを表現することで対応できている。従って、この項目は、いったん、開発完了と見なして良い。今後は、塚田先生と相談して、さらなる開発を進めるかどうか相談すること。

$\mu\text{m}$ オーダーでKPFM等の電気的特性を調べるシミュレータがあれば良い。古典電磁気学の範囲で十分。また、SPMユーザーは、実験結果から、物性値を求めることを望んでいる。物性値をシミュレータに代入してSPM推定画像を得るのと、丁度逆のことを要求している。このような逆問題に対応できれば、ユーザーのニーズに適合する。



古典電磁気学の範囲で、 $\mu\text{m}$ オーダーのKPFM等の電気的特性を取り扱う問題に関しては、macroKPFMソルバーで、対応可能となっている。従って、この課題に関しては、いったん、開発終了と見なして良い。

逆問題ソルバーは、現在、開発途上であり、これから、ソルバーを開発して対応していく必要がある。LiqAFMのタッピング機能に関して、簡単な、逆問題ソルバー機能が付与済みである。これは、試料の表面張力、ヤング率、基板からの高さ情報の3種類の物性値を、周波数シフト、位相シフトの実験観測値から、推定する機能を持っている。しかし、塚田先生が望まれているレベルには到達していない模様である。今後は、以下の課題を解決すべきである。

- 現在の物性値推定は、2次元パラメータ空間で行われている。これを3次元以上に拡張すること。
- 現在の物性値推定は、SPM画像データのある一点上で行われている。これを、画像データ全体に拡張すべきである。この際、最適化の計算量が増大してしまうので、この計算量を少なく抑える工夫が必要である。並列化計算技術等を使って対応すると良いと考えられる。また、多次元パラメータ空間の最適化を、最小二乗法フィッティングで得られた直線上のパラメータ探索に置き換える工夫が有効だと思われる。

LiqAFMの粘弾性を考慮したtappingモードのシミュレーションには興味を持てる。大気中でカンチレバーを動かし、試料表面に薄い水の被膜が有るような系のシミュレーションは興味深い。



この問題に関しては、LiqAFMタッピング機能で対応可能である。シリコン基板のような、硬い試料を仮定し、それに対して、液体の表面張力を付与する。そうすれば、シリコン基板上に薄い液体の被膜ができていた様子を再現できる。粘弾性接触解析機能は、既に実装されているので、この機能を使って分析すれば良い。従って、この項目は、いったん、開発終了と見なして良い。

DLVO理論のように、電気二重層による斥力を考慮したシミュレーションには期待が持てる。メゾスコピック系のシミュレーションとして力を入れるべきである。



この問題に関しては、かなり良いレベルで解決されている。すでに、macroKPFMソルバー、FemAFMソルバーに、DLVO理論機能が実装されている。今後は、LiqAFMに、DLVO理論機能を実装するかどうか、塚田先生と相談すること。LiqAFMにDLVO理論を実装する方法は、macroKPFM、FemAFMの場合で行った方法を、そのまま使えば良い。従って、この課題は、難しいものではない。

どのソルバにおいても、単に、シミュレーションをするのではなく、物理的な量が分かりやすく計算・導出されるようにした方が望ましい。物理量が絶対的な値で表示されるように工夫してほしい。



これは、逆問題ソルバーを充実させてほしいという要望である。この問題に関して、現時点で、定まった解決方法はない。既に、LiqAFMタッピング機能で、簡単な逆問題ソルバーが実装されているが、塚田先生が考えておられるレベルには達していない。既に実装されている機能では、試料の表面張力、ヤング率、基板からの高さ情報の3種類の物性値を、周波数シフト、位相シフトの実験観測値から、推定することができる。今後は、次の課題に取り組むこと。

- 現在、物性値の推定は、2次元パラメータ空間内で行われている。これを3次元以上に拡張すること。
- 現在、物性値の推定は、実験で得られたAFM画像のある一点上で行われている。これを、AFM画像全体に拡張すること。例えば、試料表面の表面張力の値の分布画像が得られるようにすること。これは、一点上の計算を、面全体に拡張すればよいので、原理的な困難はない。ただ、計算量の増大をどうやって防ぐかが課題である。並列化技術を使うこと、上述の多次元パラメータ空間での物性値推定を、低次元に置き換える工夫をすること、で対応できる。多次元パラメータ空間内の物性値推定は、最小二乗法をつかって、ある直線上のフィッティングに置き換えることが可能な場合がある。こうすれば、多次元空間内のパラメータ推定を、1次元直線上での物性値推定に置き換えることができ、計算量を抑えることが可能である。

## 塚田メモ

- 1 溶液中のソフトマター計測は重要。  
計測データが解釈できるようになると良い。
- 2 探針のより大きな領域までの形状などが、計測データに効くこともある。
- 3 試料の物理量の絶対値を評価できるようになるようにすることが、重要。
- 4 たんぱく質などの動的な振る舞いまで  
シミュレーションできるようになると良い。
- 5 様々な材質の微粒子の計測データについて、探針効果を明確に  
デコンボリュートできるようになるとよい。

## 感想

- (1) 実験者、装置メーカーなどが、本当に欲しいと思っている  
シミュレータ機能を把握して、それに対応することが必要。
- (2) 何がどこまでシミュレーションで分かることが  
意義があるのかを知る必要がある。

## 短期課題

- (1) 溶液中の帯電試料のAFM計測シミュレーション
- (2) 大気中帯電試料のKPFM巨視的シミュレーション
- (3) 粘弾性系タッピングモードの具体化

## 塚田先生が提示されている課題

本格的逆問題ソルバーの開発：

ベイズ統計、最適化手法等を駆使して、実験データから物性値を推測する。例えば、複数のAFM実験画像から、その特徴を学習して、探針の測定の際の癖を推定して、試料画像の再現に役立てるといった手法が有効と考えられる。また、単一のAFM画像であっても、画像上の各点での測定値から、探針の癖を推定して、AFM画像全体をキャリブレーションする、といった方法も考えられる。実験では、試料表面上のヤング率の分布、表面張力の分布が測定されているので、そのようなデータを、周波数シフト像、位相シフト像のデータから再構成できるようにするのが望ましい。周波数シフト・位相シフトのずれ関数から、表面張力、ヤング率を推定する逆問題プログラムは、試作品としてできているのでこれを参考にして、新たなプログラムを組むこと。

試料形状が時間とともに変化する場合の高速AFMシミュレーション：

時間とともに構造が変化するたんぱく質等の、高速AFM画像を測定する実験手法が進展している。これに対応したシミュレータを開発すること。これは、試料形状が時間変化する様子を、どのようにデータ化するかで、プログラムの構成が決まる。高速AFMをシミュレーションすること自体は、探針を振動させることを考慮して計算すれば問題ないはずである。

シミュレーション画像における探針形状の影響の除去(デコンボリューション)：  
SPMシミュレータから得られる画像には、探針形状の影響が見られる。この探針形状の影響を除去して、真の試料形状画像を得る技術を確立すること。デコンボリューション自体は、GeoAFMにおいて、探針形状推定と、その影響を除去する機能が実装されているので、それを参考にすること。GeoAFMでは、探針形状影響除去の手法として、Blind reconstruction methodと、ニューラルネットワーク学習の、二つの方法が採用されている。macroKPFMやFemAFMで得られたシミュレーション画像について、これらの方法で、デコンボリューションが除去できないか確認すること。現時点では、macroKPFMにおいて、探針形状の影響が大きい。従って、macroKPFMのシミュレーション結果のデコンボリューションに、力を注ぐことが重要である。

塚田先生がお考えになっている、バイオ・ソフトマテリアルAFMシミュレータ

目的：バイオ系・高分子系・電気化学系のAFM計測に対応するシミュレータ開発

計測対象：高分子系、粘弾性系、生体ナノ構造（細胞、たんぱく質等）、電気化学系、接触系

液中、特に電界液中における探針－試料間力をDLVO力などで扱い、試料の変形を含めたAFMシミュレーションを効率良く、迅速に行う。試料の表面電荷・電気二重層の効果を含め、バイオ系や電気化学系に対応する。

➡ この問題については、macroKPFM, FemAFMに、DLVO理論機能を付与することで、既に対応済みである。今後の展開としては、LiqAFMにDLVO理論機能を追加する可能性が考えられる。この問題は、比較的早い段階で、手を付けるのが良いと思われる。

メニスカス形成距離を接触問題で扱い、電気化学SPM用のシミュレーションを行う。

➡ メニスカス形成の問題については、これまで、全く検討がされて来なかった。従って、取り扱いが難しい課題である。これまで、LiqAFM, FemAFMに、粘弾性接触問題解析機能を付与してきたが、この手法を基礎として取り組めば良いと考えられる。いずれにしても、塚田先生と十分に相談して着手すべき課題である。

散逸量を計算して、バイオ系や粘弾性系・接触系のAFM法を提案し、そのシミュレータを開発する。



散逸量の計算は、LiqAFM, FemAFMに粘弾性接触問題解析機能を付与する際、フォースカーブがヒステリシスを持つようにするモデルを構築することで対応してきた。散逸量の計算は、AFM位相シフトの計算において必要である。従って、これまでの開発で、既に散逸量の計算は行ってきたといえる。塚田先生が意図する散逸量計算シミュレータについて、さらに突っ込んだ議論をして、今後、さらに開発を進めるか、現状で十分と見なすかの判断をする必要がある。

## SPMシミュレータ：今後の開発について

### 開発環境

#### (1)HP Elite Desk 64bit Windows 10 (吾妻が使っていたパソコン)

Qt(C++)開発環境が入っている

Qt(C++)では、64bit実行ファイルは生成できるが、32bit実行ファイルは生成できない

#### (2)Dospara Monarch XG 64bit Windows 8 (GPU搭載)

Intel Fortran, Qt(C++)開発環境が入っている  
CUDA GPU (Fortran)開発環境も入っている

#### (3)DELL GXQV032 64bit Windows (篠塚さんが使っていたパソコン)

Intel Fortran, Qt(C++)開発環境が入っている

## SPMシミュレータの構成

GUIは、Qt(C++)でプログラムされている

Qtのバージョンは4である

(現在のQtのバージョンは5であるが、これをあえて使わないことにしている)

ソルバーは、Qt(C++)でプログラムされているものと、Intel Fortranでプログラムされているものが混在している

例えば、macroKPFM, DFTBはFortranである

一方、FemAFM, LiqAFMは、Qt(C++)である

DFTBには、Cuda GPUを使ったバージョンも存在する

塚田先生が指示された開発課題

(これらを、すべて、実際に開発するかどうかは、社長、塚田先生と相談し、状況を見て判断すること)

GeoAFMにおいて、ファンデルワールス半径によるGeoAFM像を作成する機能を追加する

LiqAFMタッピング機能の逆問題ソルバーは、2次元のパラメータ空間の最適化を行っている。これを、3次元以上に拡張すること。

FemAFMの周波数シフト像表示に関して、どの値で、探針に引力・斥力が働いているか明示すること

現在、FemAFM、macroKPFMのDLVO理論機能では、試料に水分子を吸着させることはできている。これを、探針にも、水分子が吸着できるようにプログラムを改良すること。

試料形状が時間的に変化する場合の、AFM画像シミュレーションは、まだ開発されていない。この問題に着手すること。

## SPMシミュレータの現時点での構成

Analyzer SPM実験画像データのデジタル処理プロセッサ

GeoAFM 幾何学情報に基づく高速相互予測AFMシミュレータ

FemAFM 連続弾性体AFMシミュレータ DLVO理論機能追加済み

LiqAFM 液中ソフトマテリアルAFMシミュレータ 簡易逆問題機能追加済み

macroKPFM マクロスケールKPFMシミュレータ DLVO理論機能追加済み

CG 構造最適化AFM像シミュレータ

MD 分子動力学AFM像シミュレータ

DFTB 量子論的SPMシミュレータ

SetModel 原子モデル作成ツール

LiqAFMに本格的な逆問題計算機能を追加する作業が進行中

## LiqAFMに追加する本格的な逆問題機能について

現状では、以下の特徴を持つ逆問題計算機能が実装されている。

- 与えられたAFM周波数シフト、位相シフトの値から、試料のヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さの三つの物理量について推定する。
- 三つの物理量のうち、一つの物理量の値が確定しているとして、残り二つの物理量を推定する。
- AFM周波数シフト、位相シフトの値のずれ関数を定義し、そのずれ関数が最小となる点を探す、一種の最適化問題として定式化されている。
- 推定方法として、二つの物理量から成る2次元パラメータ空間を、格子メッシュ状に分割して、すべての格子点について、ずれ関数を計算する`global_mode`が用意されている。
- メッシュ上の格子点を、ランダムウォークの要領で推移し、最小のずれ関数値を与える点を推測する`local_mode`が用意されている。
- 2次元パラメータ空間上で、ずれ関数値が極小となる直線を、最小二乗法の方法で求め、その直線上でずれ関数値が最小となる点を探す方法も用意されている。

## 今後の展開

- これまで、2次元パラメータ空間内で、ずれ関数値が最小となる点を探していたが、これを、3次元空間内での探索問題に拡張する。
- AFM周波数シフト、位相シフトの実験画像から、例えば、試料表面上の、ヤング率、表面張力の分布画像が推測できるようにする。
- これまで、ランダムウォーク、最小二乗法を使って逆問題に取り組んできたが、もう一つ別の手法を取り入れると、解き方に幅が出てきて望ましい。SPMシミュレータでは、Analyzerでの画像補正にニューラルネット学習原理を取り入れているので、これを参考にして、機械学習の方法で物理量を推定するアルゴリズムを模索すると良い。

青い文字が、新たに追加される機能

赤い文字が、新たに追加されたバイオ・ソフトマテリアル関連ユーザー向けの機能

ソルバー	特徴	機能
<b>Analyzer</b> 実験データ画像 処理プロセッサ	シミュレーションの前処理を行う。 実験データを補正して計算用入力 データへ変換する。探針形状の予 測と形状効果の補正を行う。	<ul style="list-style-type: none"><li>・探針形状推定機能</li><li>・メーカー各社のSPM実験データの読み込み機能</li><li>・画像データの傾斜補正機能等</li></ul>
<b>SetModel</b> 原子モデリング ツール	シミュレーションの前処理を行う。 探針と試料の原子構造モデルを作 成する。	<ul style="list-style-type: none"><li>・半導体薄膜等の結晶性の周期構造を持ったモデルを作成する機能</li><li>・個々の原子を操作して欠陥・不純物や探針構造を作成する機能</li><li>・他のソフトでモデリングした構造の読み込みや、終端に水素を付加する機能</li></ul>
<b>GeoAFM</b> 高速相互予測 AFMシミュレ ータ	像解像度は原子尺度ではなく、メ ゾからマクロスケールでのシミュ レーションである。精密でないが、 試料構造・探針構造・AFM像の二 つから、残りを一つを高速で予測 することができる。液中・大気 中・ソフトマター全てに対応する。 近似的ではあるが実用的といえる。	<ul style="list-style-type: none"><li>・試料と探針から計測像を予測する機能</li><li>・計測像と探針から試料形状を予測する機能</li><li>・計測像と試料から探針形状を予測する機能</li><li>・対象（カラーゲン、タンパク質分子）</li></ul>

実用・開発者向き

## FemAFM 連続弾性体AFM シミュレータ

試料および探針の弾性変形を考慮して、メゾからマクロスケールの像解像度でAFMイメージを計算する。GeoAFMとの併用、あるいはLiqAFM(tapping)との併用で活用する。

DLVO理論シミュレーション機能が追加されている。

- ・カンチレバーの垂直振動と捩れ振動に対応
- ・単振動加振・二重加振／多モードに対応
- ・カンチレバーの共鳴曲線（真空中、大気中、液中）を描く
- ・マルチコア並列計算機能
- ・対象（コラーゲン、タンパク質分子）
- ・DLVO理論機能追加により、コロイド溶液中の電気二重層による斥力の効果が評価可能となった
- ・DLVO理論機能により、探針・試料が電解溶液中にあるとして、電気二重層力の効果によるデバイ遮蔽効果を評価できるようになった。また、ファンデルワールス力と、電気二重層による斥力の、二つの力の競合を調べるのが可能となった。
- ・ $\mu\text{m}$ オーダーのKPFM観察、誘電率、分極など、様々な試料・探針の電気特性に興味を持っているユーザーに適している。例えば、金属基板に試料を乗せ、探針でSPM観察する際、試料表面に3から4個の水分子が付着した場合の影響について、シミュレーションが可能となった。
- ・電気二重層による斥力を考慮したシミュレーションによって、メゾスコピック系を調べることが可能になった。

## LiqAFM (tapping)

液中ソフトマテリアルAFMシミュレータ

液中のカンチレバー振動を考慮しつつ、ソフトマターおよび粘弾性凝着系のタッピングモードシミュレーションを行うことができる。単振子に射影した計算では、標準理論を用いると効率的である。適用領域は(液中)ソフトマター、高分子など広範囲であり、使いやすくニーズは高いと思われる。簡易版の逆問題機能が追加されている。

- ・カンチレバーの垂直振動と捩れ振動に対応
- ・単振動加振・二重加振／多モードに対応
- ・カンチレバーの共鳴曲線（真空中、大気中、液中）を描く
- ・マルチコア並列計算機能
- ・対象（コラーゲン、タンパク質分子）
- ・逆問題解析機能が追加された。これにより、AFM周波数シフト、位相シフトの値から、試料のヤング率、表面張力、高さ情報が逆算できるようになった。
- ・タッピング機能が強化された。これにより、探針－試料間の粘弾性凝着効果を考慮したスキャンをシミュレーションすることが可能となった。
- ・タッピング・モードの逆問題計算機能が強化された。これにより、周波数シフト・位相シフトの観測データより、試料のヤング率、表面張力、高さ情報を逆算することが可能となった。
- ・粘弾性を考慮したタッピング・モードのシミュレーションによって、大気中でカンチレバーを動かす、試料表面に薄い水の被膜が有るような系のシミュレーションが実行可能となった。

## macroKPFM 巨視的KPFM像シミュレータ

KPFM像シミュレーションを、 $\mu\text{m}$ から $\text{nm}$ のオーダーで行う。境界要素法を用いて、古典電磁気学のポテンシャル問題を解くことに相当する。  
現在、DLVO理論機能追加作業中である。

- ・ 任意の形状の誘電体を試料として設定可能
- ・ 試料表面に電荷の分布を指定可能
- ・ 任意の位置の電荷を置くことができる
- ・ 対象(高分子、トナー粒子)
- ・ DLVO機能追加により、コロイド溶液中の電気二重層による斥力の効果が評価できる予定である。
- ・ DLVO理論機能により、探針・試料が電解溶液中にあるとして、電気二重層力の効果によるデバイ遮蔽効果を評価できるようになった。また、ファンデルワールス力と、電気二重層による斥力の、二つの力の競合を調べることも可能となった。
- ・  $\mu\text{m}$ オーダーでKPFM等の電気的特性を調べるシミュレータである。古典電磁気学の範囲で調べる。
- ・ 将来的には、実験結果から物性値を求めることを望んでいるSPMユーザーに対して、物性値をシミュレータに代入してSPM推定画像を得るのと、丁度逆のことを行う、逆問題計算機能を提供する予定である。
- ・ 電気二重層による斥力を考慮したシミュレーションによって、メゾスコピック系を調べることが可能になった。

研究者向き

<p><b>CG</b> 構造最適化AFM 像シミュレータ</p>	<p>古典力学法による原子モデルの最適化計算を行う。液中CG-RISM計算も可能である。 摩擦顕微鏡シミュレーション機能を追加する可能性あり。</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 散逸像・周波数シフト像、フォースマップ等を計算</li> <li>・ 接触高さ、力一定のコンタクトモード像計算</li> <li>・ 振幅一定、周波数シフト一定のダイナミックモード像計算</li> <li>・ 対象（コラーゲン、タンパク質分子）</li> <li>・ ゴム・高分子等の摩擦顕微鏡画像シミュレーション機能追加予定</li> </ul>
<p><b>MD</b> 分子動力学AFM 像シミュレータ</p>	<p>古典力学法による原子モデルの分子動力学計算を行う。</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ フォースカーブの計算</li> <li>・ 三次元力場の計算、散逸像・周波数シフト像予測に対応</li> <li>・ AFM探針－測定試料間の相互作用に伴う試料の動的変形挙動を予測計算</li> <li>・ 液中計算に伴う溶媒の分子動力学計算</li> <li>・ 対象（コラーゲン、タンパク質分子）</li> </ul>
<p><b>DFTB</b> 量子論的SPM像 シミュレータ</p>	<p>量子力学計算による探針力とトンネル電流の計算を行う。STM/STS, AFM, KPFMに対応している。 KPFMはより実用的に拡張したいと考えている。 スピン偏極走査型トンネル顕微鏡シミュレーション機能追加可能性あり。</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ AFM像：力、周波数シフト分布を計算</li> <li>・ STM像：高さ一定モードのトンネル電流像を計算</li> <li>・ STM像：電流一定モードのトポグラフィ像を計算</li> <li>・ KPFM像：局所接触電位差分布を計算</li> <li>・ 多重極静電力、軌道混成力の計算可(KPFM)</li> <li>・ 分子修飾探針の影響を考慮可(STM)</li> <li>・ 対象（半導体ドーパント）</li> <li>・ バンド構造計算機能が追加された。PHASE/Oとの連携運用も視野に入れている。</li> <li>・ スピン偏極走査型トンネル顕微鏡シミュレーション機能により、スピントロニクス分野への展開も視野に入れている。</li> </ul>

バイオ・ソフトマテリアル関連ユーザー向けに、新たに追加された機能

LiqAFMタッピング機能

探針-試料間の粘弾性凝着効果を考慮したスキャン

LiqAFMタッピング・モードの逆問題計算機能

周波数シフト・位相シフトの観測データより、試料のヤング率、表面張力、高さ情報を逆算

FemAFM\_DLVO機能

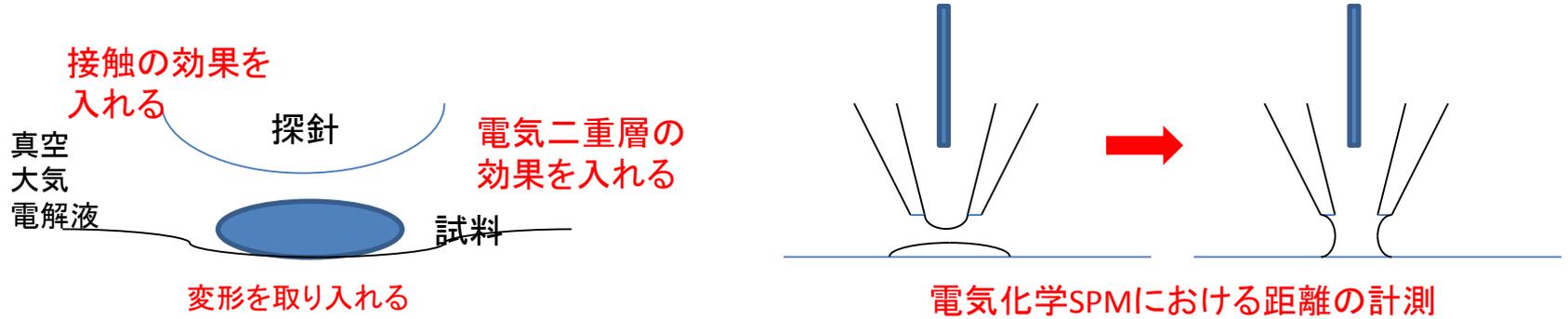
探針・試料が電解溶液中にあるとして、電気二重層力の効果によるデバイ遮蔽効果を評価  
ファンデルワールス力と、電気二重層による斥力の、二つの力の競合を調べる

macroKPFM\_DLVO機能

探針・試料が電解溶液中にあるとして、電気二重層力の効果によるデバイ遮蔽効果を評価  
ファンデルワールス力と、電気二重層による斥力の、二つの力の競合を調べる

今後の展開としては、逆問題機能が残されている

# 国プロ提案課題: ソフト・バイオマテリアルAFMシミュレータ



**目的:** バイオ系・高分子系・電気化学系のAFM計測に対応するシミュレータ開発

**計測対象:** 高分子系、粘弾性系、生体ナノ構造(細胞、たんぱく質等)、電気化学系、接触系

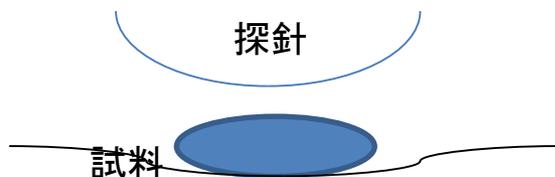
**基礎となる現有シミュレータ:** GeoAFM, FemAFM, LiqAFM(接触問題) + 新たな付加機能

**特徴:** 液中特に電界液中における探針試料間力をDLVO力などで扱い、試料の変形を含めたAFMシミュレーションを効率よく・迅速に行う。試料の表面電荷・電気二重層の効果を含め、バイオ系や電気化学系に対応する。必要に応じGeoAFMで簡単な試行像を得て、変形まで含めた詳細計算に移る。メニスカス形成距離を接触問題で扱い、電気化学SPM用のシミュレーションを行う。散逸量を計算して、バイオ系や粘弾性系・接触系のAFM法を提案し、そのシミュレータを開発する。

**開発方針:** 各分野の実験家(中嶋先生、末永先生、他、分担者候補でもある)のご意見を聞きつつ、どのようなシミュレーションを行うかの課題設定を行う。具体的なシミュレーション理論の研究と新たなソフト開発の検討を行う。国プロとして魅力的なストーリーを作る。

# 何をどうシミュレートするか

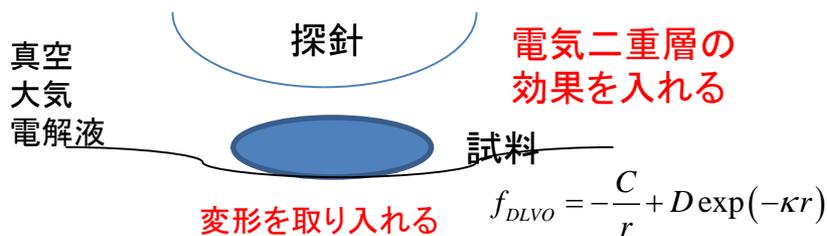
## GeoAFM



GeoAFMでは力を計算しないので  
真空中、大気中、(電解)液中の  
いずれにも対応している。

ほぼできている。

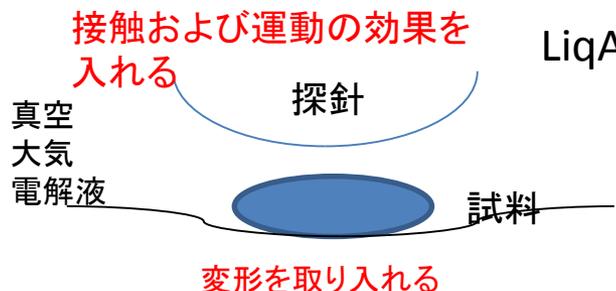
## FemAFM



FemAFMでは、原子レベルではないが  
試料変形を取り入れることができる。  
また適当な力のモデルを採用して、真空中、  
大気中、(電解)液中の環境下の計測を  
シミュレーションできる。

多少の新規開発部が必要

## LiqAFM+FemAFM?



接触問題を含め探針の動力学をとく。  
試料の粘弾性変形を含める。

理論モデルと計算法の開発が必要

## XXXX社様訪問(2017年10月20日)で得られた課題

$\mu\text{m}$ オーダーでKPFM等の電気的特性を調べるシミュレータがあれば良い。古典電磁気学の範囲で十分。また、SPMユーザーは、実験結果から、物性値を求めることを望んでいる。物性値をシミュレータに代入してSPM推定画像を得るのと、丁度逆のことを要求している。このような逆問題に対応できれば、ユーザーのニーズに適合する。

→ 一部は、macroKPFM\_DLVOで、対応可能

macroKPFMについての逆問題計算機能が必要か？

日立ハイテクノロジーズでは、誘電率、分極など、様々な試料・探針の電気特性に興味を持っている。例えば、金属基板に試料を乗せ、探針でSPM観察する際、試料表面に3から4個の水分子が付着した場合の影響について、興味を持っている。

→ FemAFM\_DLVOおよびmacroKPFM\_DLVOで、対応可能

探針に水分子を付着させることは、技術的に難しい

試料に水分子を付着させることは、既に可能

LiqAFMの粘弾性を考慮したtappingモードのシミュレーションには興味を持てる。大気中でカンチレバーを動かし、試料表面に薄い水の被膜が有るような系のシミュレーションは興味深い。



LiqAFMのtapping機能で、対応可能

現在、薄い水被膜のシミュレーションは、硬い基板表面に、表面張力を定義することで対応している  
この取り扱い方法は正しいか？

DLVO理論のように、電気二重層による斥力を考慮したシミュレーションには期待が持てる。メゾスコピック系のシミュレーションとして力を入れるべきである。



FemAFM\_DLVO、macroKPFM\_DLVOで、対応可能

どのソルバにおいても、単に、シミュレーションをするのではなく、物理的な量が分かりやすく計算・導出されるようにした方が望ましい。物理量が絶対的な値で表示されるように工夫してほしい。



一部、LiqAFMのtapping機能の逆問題で対応可能  
すでに、LiqAFMにおいて逆問題ソルバーが完成している  
今後は、これをさらに拡張した逆問題ソルバーを開発して対応する予定

今後、どのように、バイオ・ソフトマテリアルAFMシミュレータを拡充していくか

たんぱく質などの動的な振る舞いまでシミュレーションできるようになると良い。

様々な材質の微粒子の計測データについて、探針効果を明確にデコンボリュートできるようにになるとよい。



どのようなソルバーで対応すべきか、方針が未定

## 逆問題ソルバーの開発現状

LiqAFM タッピング機能に追加される、逆問題ソルバー機能は、現在、開発中の段階である。

ソースコード、実行ファイル、計算データは、以下に保存されている。

DOSPARA製64bit Windows 8マシン Monarch XG

C:¥Users¥h-azuma¥Qt\_workspace¥LiqAFM\_20180417¥liqafm\_jkr\_fsps\_inv2

周波数シフト、位相シフトのずれ関数として、以下を定義する

$$f = \sqrt{\left(\frac{\Delta\nu - \Delta\nu_{\text{obs}}}{\omega_0 / (2\pi)}\right)^2 + \left(\frac{\Phi - \Phi_{\text{obs}}}{\pi}\right)^2}$$

$\Delta\nu$  : シミュレーション計算で得た周波数シフト

$\Delta\nu_{\text{obs}}$  : 観測値として得られた周波数シフト

$\omega_0$  : カンチレバーの共鳴振動周波数

$\Phi$  : シミュレーション計算で得た位相シフト

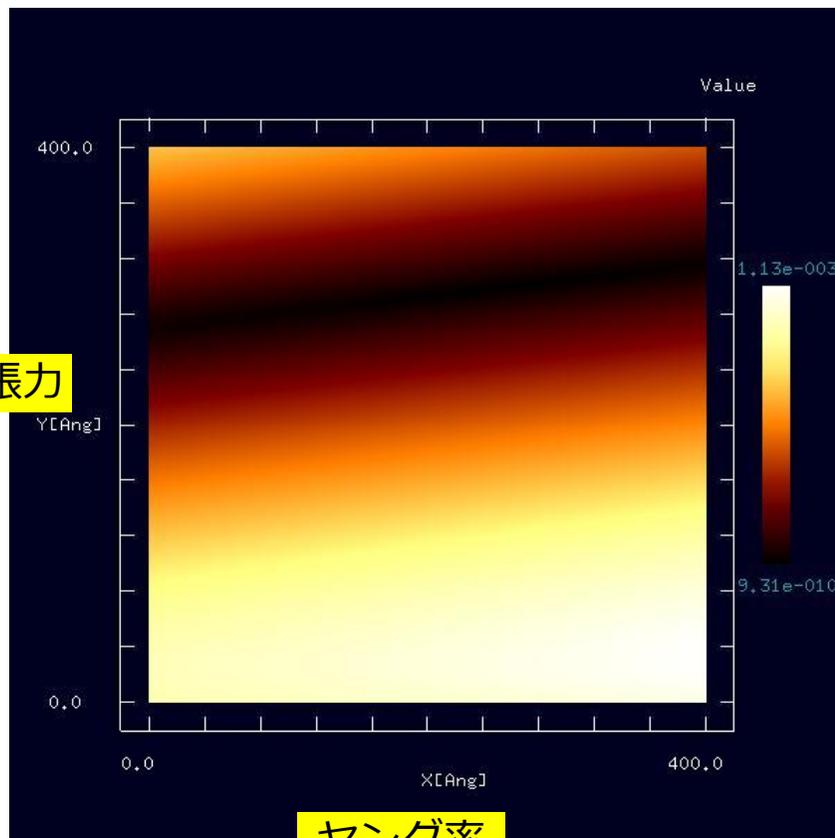
$\Phi_{\text{obs}}$  : 観測値として得られた位相シフト

上記のずれ関数の値を最小にするようなヤング率、表面張力を求めたいとする

周波数シフトの観測値を24.888[Hz]  
位相シフトの観測値を-0.00123181[radian]  
試料表面の基板からの高さを0.0[nm]  
粘性抵抗を10.0[N/m]  
ポアソン比を0.22とする

真空環境下を仮定

表面張力



ヤング率：70.0～80.0[GPa]  
表面張力：0.1～0.5[N/m]  
として、LiqAFMタッピング機能で  
ずれ関数を計算して、2次元平面上  
にプロットした図  
明るい部分は、ずれ関数が大きな  
値を取っている領域  
暗い部分は、ずれ関数が小さな値  
を取っている領域

ずれ関数が極小値を取る領域は、2次  
元平面上で帯状に分布している

次の方法で「ずれ関数」が最小になる点を探すことにする

(1)表面張力とヤング率のパラメータ探索範囲の中で、数十点、選び出して、ずれ関数の値を求める

(2)2次元のパラメータ平面上で、ずれ関数の値が最小となる直線を、最小二乗法フィッティングで求める

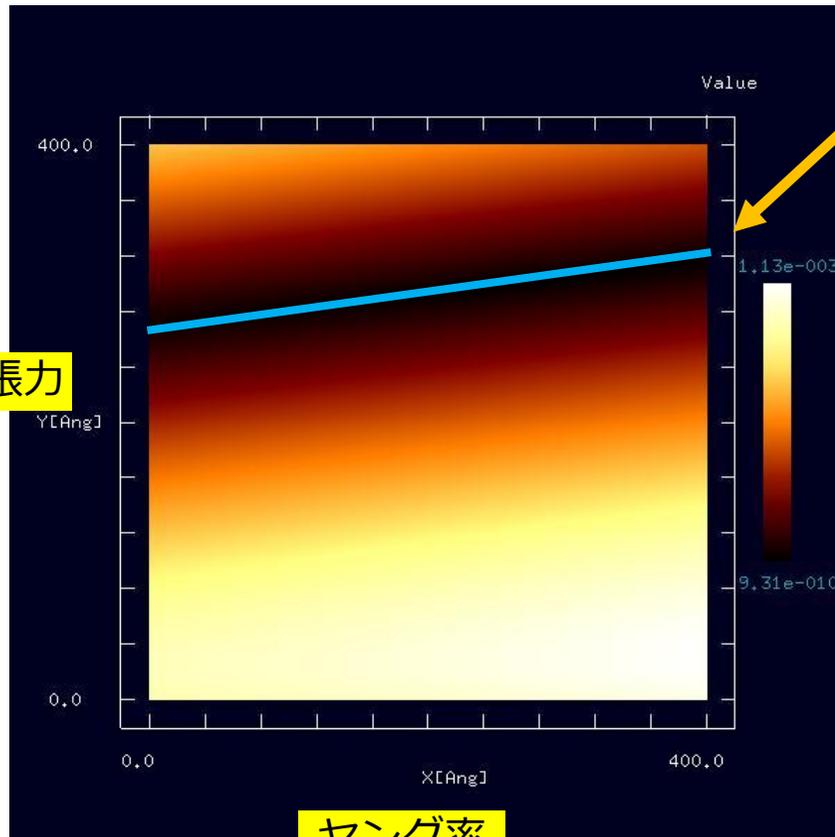


これは、ずれ関数が局所的に最小となる点の集合が、2次元パラメータ平面上で、直線状に分布することが経験的に分かっているからである

(3)最小二乗法で求めた直線上で、ずれ関数を最小にする点を求める

## 手続きの流れ

表面張力



ヤング率

パラメータの2次元平面上に、標本点を数十個選び出して、それを元にして、最小二乗法フィッティングで直線を求める

標本点とは、ヤング率、表面張力、ずれ関数の、三つの値のセット

フィッティング直線状に等間隔に点を置いて、その点上でずれ関数を評価する  
ずれ関数の値が最小となる点が、逆問題の答えである、ヤング率と表面張力の値と考える

パラメータ2次元平面内で最小値を求める問題が、フィッティング直線上で最小値を求める問題に書き換えられた

→2次元の問題が、1次元の問題に変換されたので、計算量が少なくなった

## 最小二乗法フィッティングのやり方

$x$  : ヤング率

$y$  : 表面張力

$f$  : 周波数シフト、位相シフトのずれ関数

$i$  番目のサンプル :  $x_i, y_i, f_i$

フィッティング直線 :  $y = ax + b$

$$S = \sum_i \frac{1}{f_i^2} [y_i - (ax_i + b)]^2$$

$$\frac{\partial S}{\partial a} = \frac{\partial S}{\partial b} = 0 \text{ を要請する}$$

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{AC - B^2} \begin{pmatrix} C & -B \\ -B & A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$$

$$A = \sum_i \frac{x_i^2}{f_i^2}, \quad B = \sum_i \frac{x_i}{f_i^2}, \quad C = \sum_i \frac{1}{f_i^2}, \quad v = \sum_i \frac{y_i}{f_i^2}, \quad u = \sum_i \frac{x_i y_i}{f_i^2}$$

## 例題1

最適なヤング率、表面張力を求める

真空環境下を仮定

試料表面の基板からの高さ：0.1[nm]

粘性抵抗：20.0[N/m]

ポアソン比：0.3

ヤング率：80.0[GPa]

表面張力：0.5[N/m]

周波数シフトの観測値：-39.7696[Hz]

位相シフトの観測値：-0.002084433[radian]

ヤング率：66.0～93.0[GPa]

表面張力：0.27～0.72[N/m]

として、ずれ関数を最小にする点を探す問題を考える

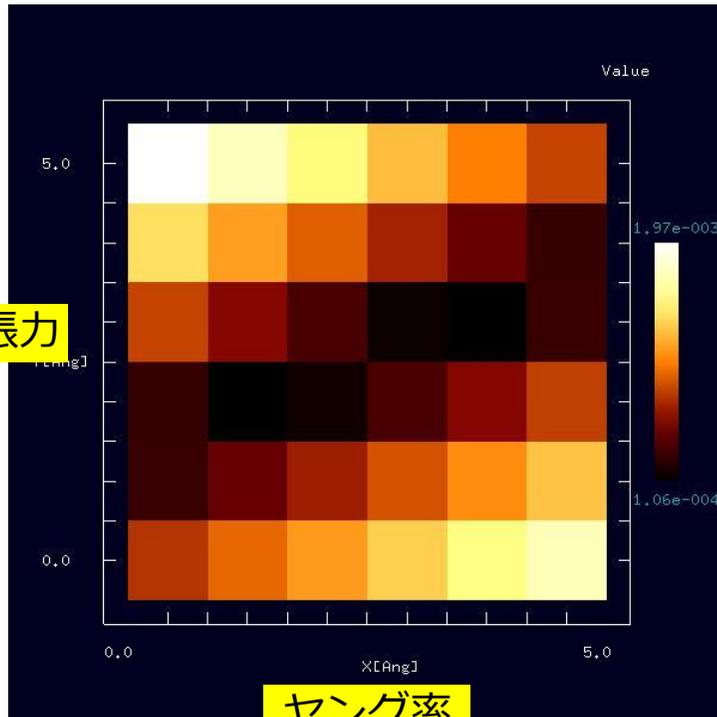
正解として、

ヤング率：80.0[GPa]

表面張力：0.5[N/m]

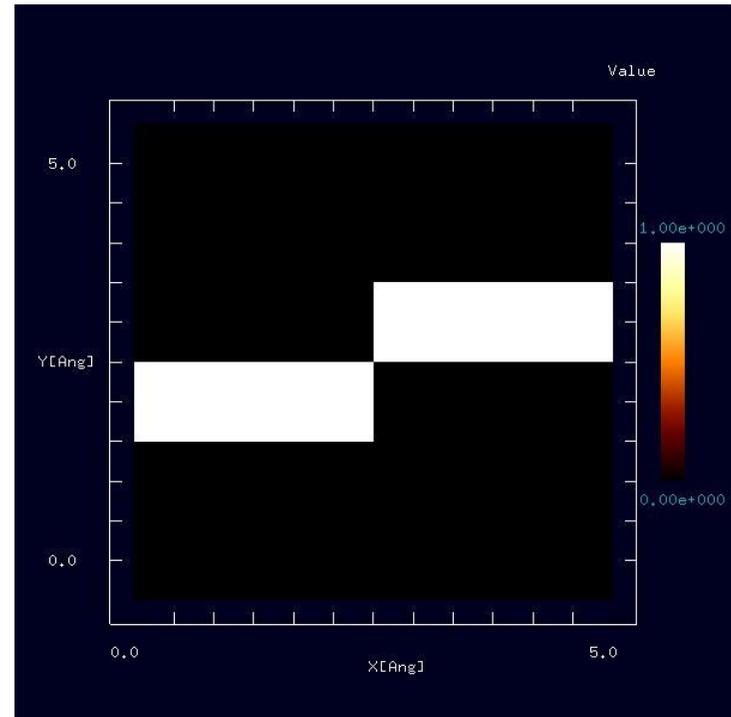
に近い値が得られたら合格

表面張力



ヤング率

標本点を2次元平面上で等間隔に6×6として、  
ずれ関数の値の分布を示したグラフ



最小二乗法で得られた直線を、  
6×6の区画で表した図

フィッティング直線： $y = ax + b$

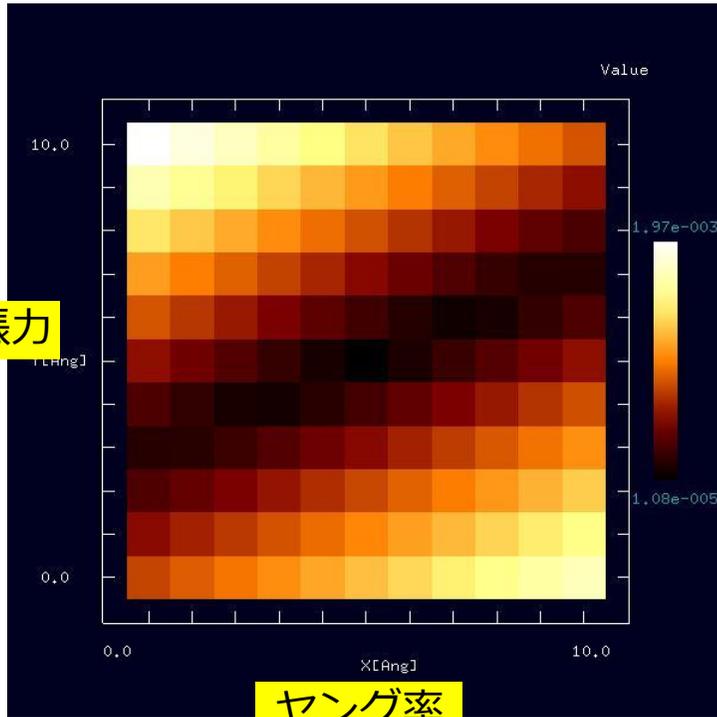
係数 $a=0.00602018$ ,  $b=0.016659$

フィッティングで得られた直線を、100等分して、  
ずれ関数が最小となる点を探す



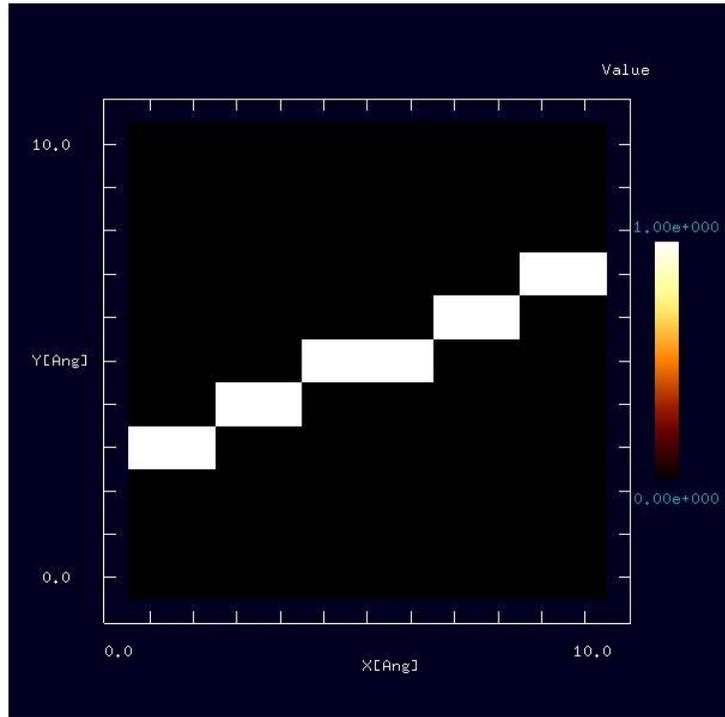
ヤング率：79.77[GPa]、表面張力：0.496889[N/m]

表面張力



ヤング率

標本点を2次元平面上で等間隔に11×11として、  
ずれ関数の値の分布を示したグラフ



最小二乗法で得られた直線を、  
11×11の区画で表した図

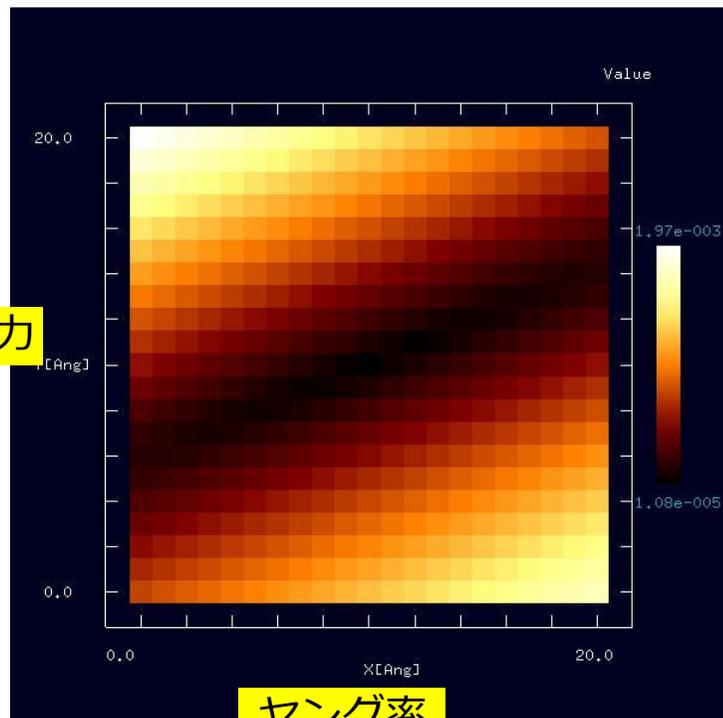
フィッティング直線： $y = ax + b$

係数 $a=0.00639995$ ,  $b=-0.0136682$

フィッティングで得られた直線を、200等分して、  
ずれ関数が最小となる点を探す

→ ヤング率：79.77[GPa]、表面張力：0.496856[N/m]

表面張力



ヤング率

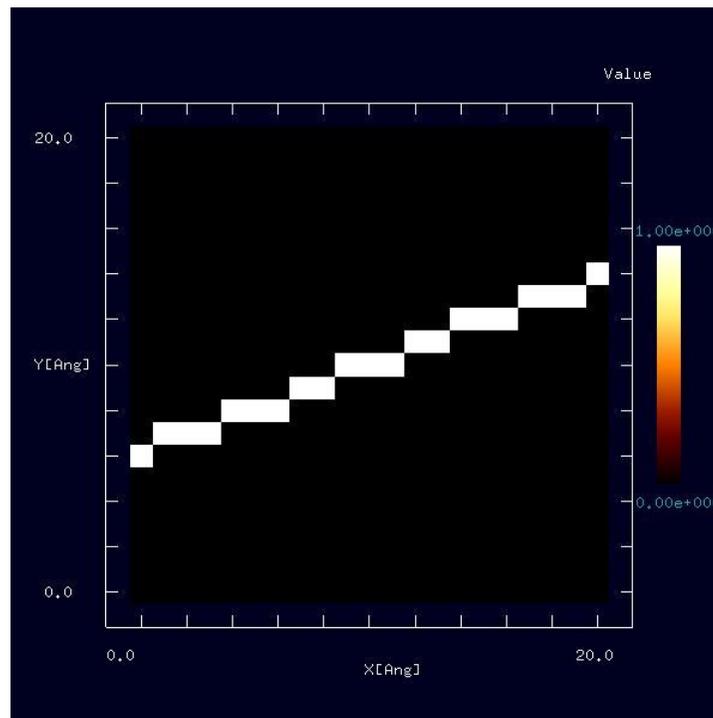
標本点を2次元平面上で等間隔に21×21として、  
ずれ関数の値の分布を示したグラフ

フィッティング直線： $y = ax + b$

係数 $a=0.00638038$ ,  $b=-0.011659$

フィッティングで得られた直線を、400等分して、  
ずれ関数が最小となる点を探す

ヤング率：79.8375[GPa]、表面張力：0.497735[N/m]



最小二乗法で得られた直線を、  
21×21の区画で表した図

## 例題2

最適な表面張力、試料表面の基板からの高さを求める

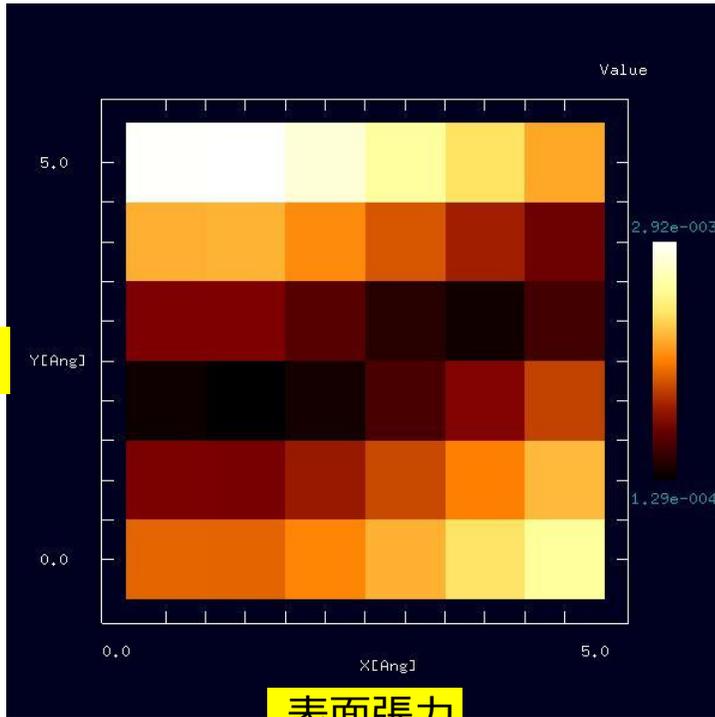
真空環境下を仮定

粘性抵抗：12.0[N/m]  
ポアソン比：0.3  
ヤング率：80.0[GPa]  
表面張力：0.25[N/m]  
試料表面の基板からの高さ：0.1[nm]  
周波数シフトの観測値：-170.1997[Hz]  
位相シフトの観測値：-0.00056303[radian]

表面張力：0.11～0.43[N/m]  
試料表面の基板からの高さ：-0.07～0.29[nm]  
として、ずれ関数を最小にする点を探す問題を考える

正解として、  
表面張力：0.25[N/m]  
試料表面の基板からの高さ：0.1[nm]  
に近い値が得られたら合格

高さ



表面張力

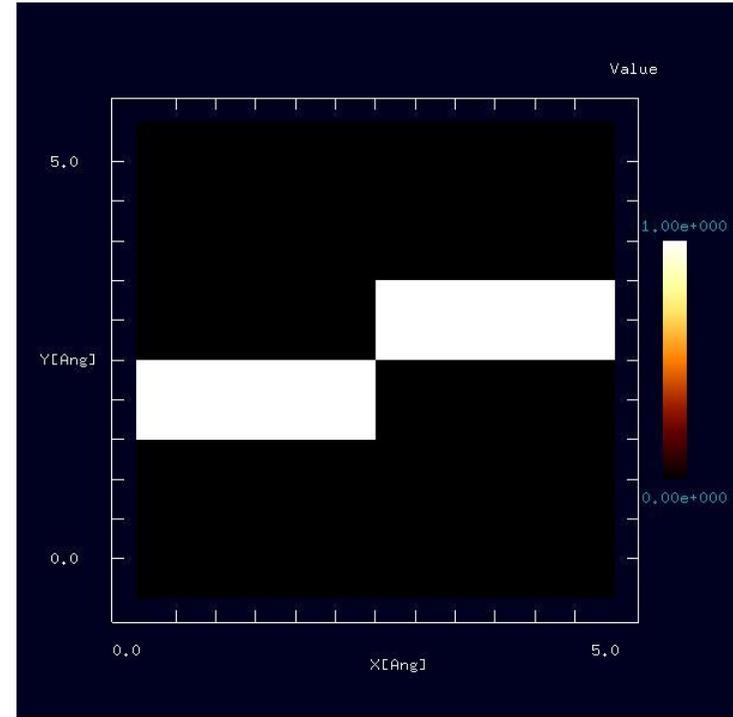
標本点を2次元平面上で等間隔に6×6として、  
ずれ関数の値の分布を示したグラフ

フィッティング直線： $y = ax + b$

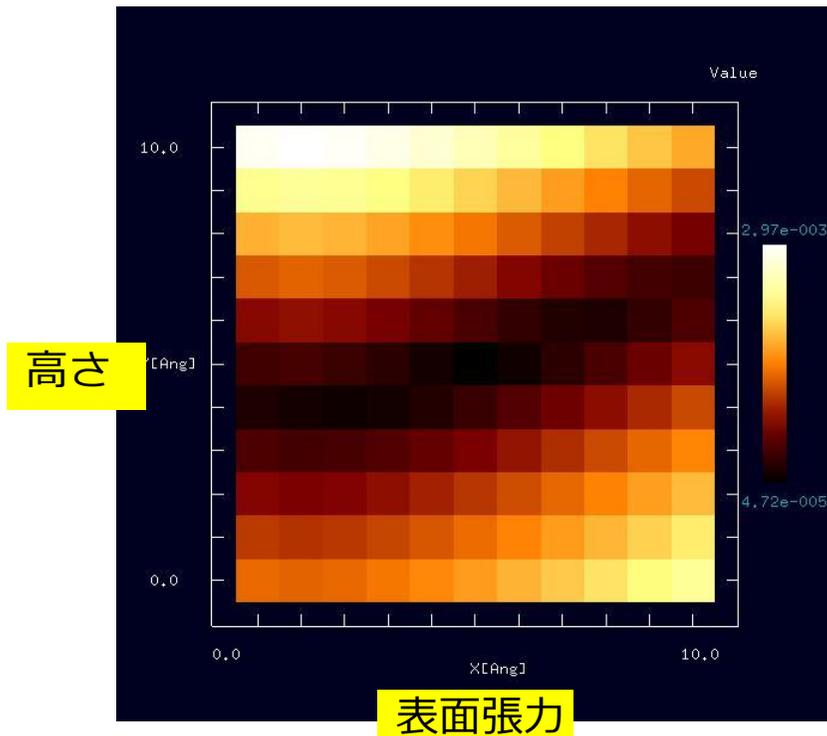
係数 $a=2.88724$ ,  $b=0.280269$

フィッティングで得られた直線を、100等分して、  
ずれ関数が最小となる点を探す

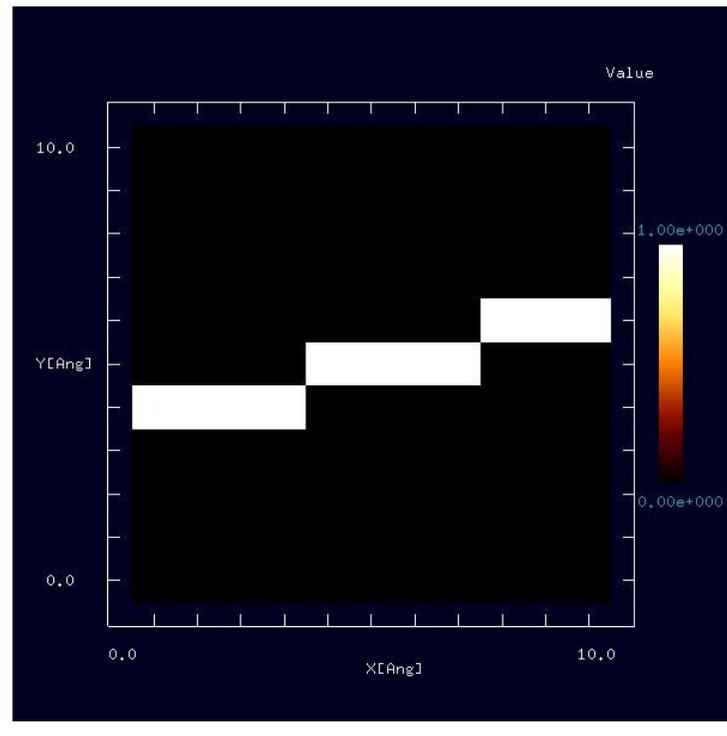
表面張力：0.2508[N/m]、試料表面の基板からの高さ：0.100439[nm]



最小二乗法で得られた直線を、  
6×6の区画で表した図



標本点を2次元平面上で等間隔に11×11として、  
ずれ関数の値の分布を示したグラフ



最小二乗法で得られた直線を、  
11×11の区画で表した図

フィッティング直線： $y = ax + b$

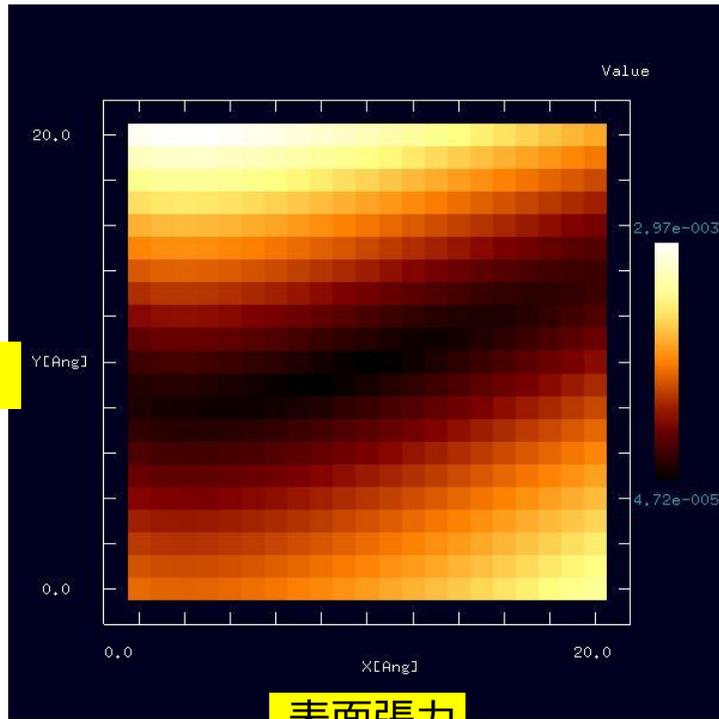
係数 $a=2.93077$ ,  $b=0.291201$

フィッティングで得られた直線を、200等分して、ずれ関数が最小となる点を探す



表面張力：0.2588[N/m]、試料表面の基板からの高さ：0.104968[nm]

高さ



表面張力

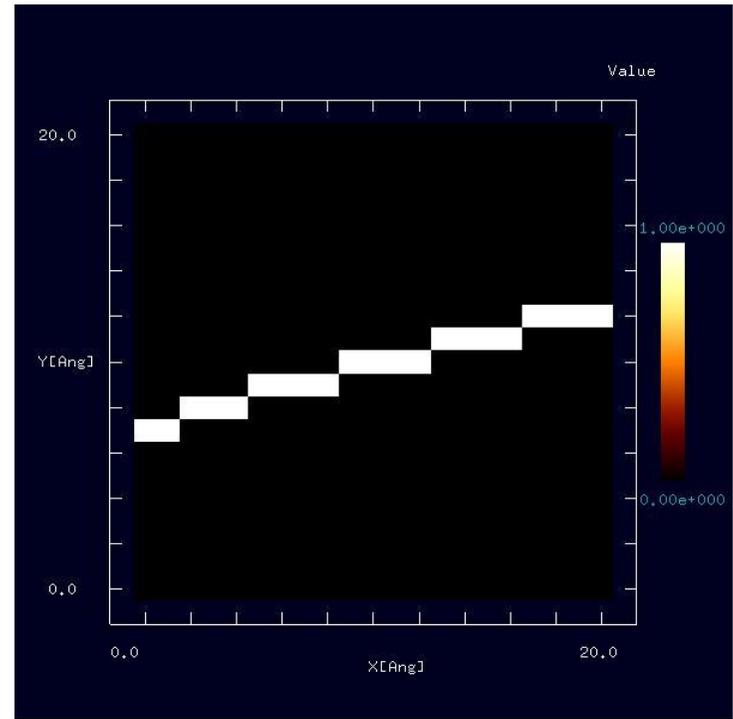
標本点を2次元平面上で等間隔に21×21として、  
ずれ関数の値の分布を示したグラフ

フィッティング直線： $y = ax + b$

係数 $a=2.93925$ ,  $b=0.276189$

フィッティングで得られた直線を、400等分して、  
ずれ関数が最小となる点を探す

表面張力：0.2564[N/m]、試料表面の基板からの高さ：0.102981[nm]



最小二乗法で得られた直線を、  
21×21の区画で表した図

### 例題3

最適なヤング率、試料表面の基板からの高さを求める

真空環境下を仮定

粘性抵抗：11.0[N/m]

ポアソン比：0.3

表面張力：0.5[N/m]

ヤング率：80.0[GPa]

試料表面の基板からの高さ：0.5[nm]

周波数シフトの観測値：-702.8858[Hz]

位相シフトの観測値：-0.00271521[radian]

ヤング率：67.0～94.0[GPa]

試料表面の基板からの高さ：0.0～2.7[nm]

として、ずれ関数を最小にする点を探す問題を考える

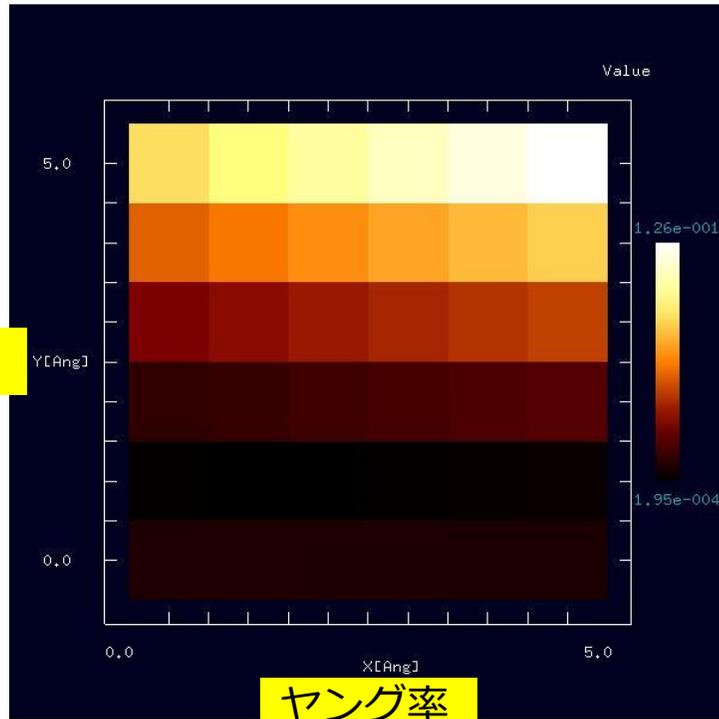
正解として、

ヤング率：80.0[GPa]

試料表面の基板からの高さ：0.5[nm]

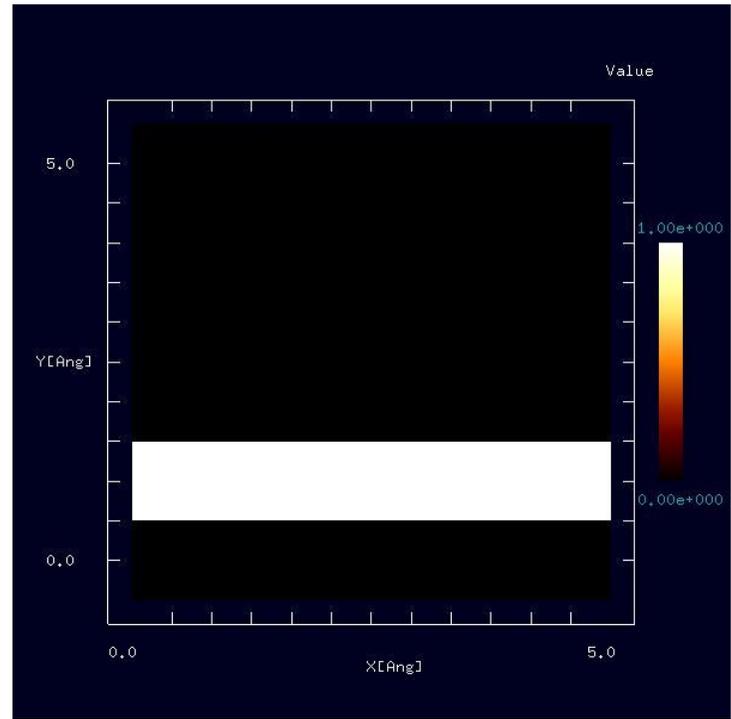
に近い値が得られたら合格

高さ



ヤング率

標本点を2次元平面上で等間隔に6×6として、  
ずれ関数の値の分布を示したグラフ



最小二乗法で得られた直線を、  
6×6の区画で表した図

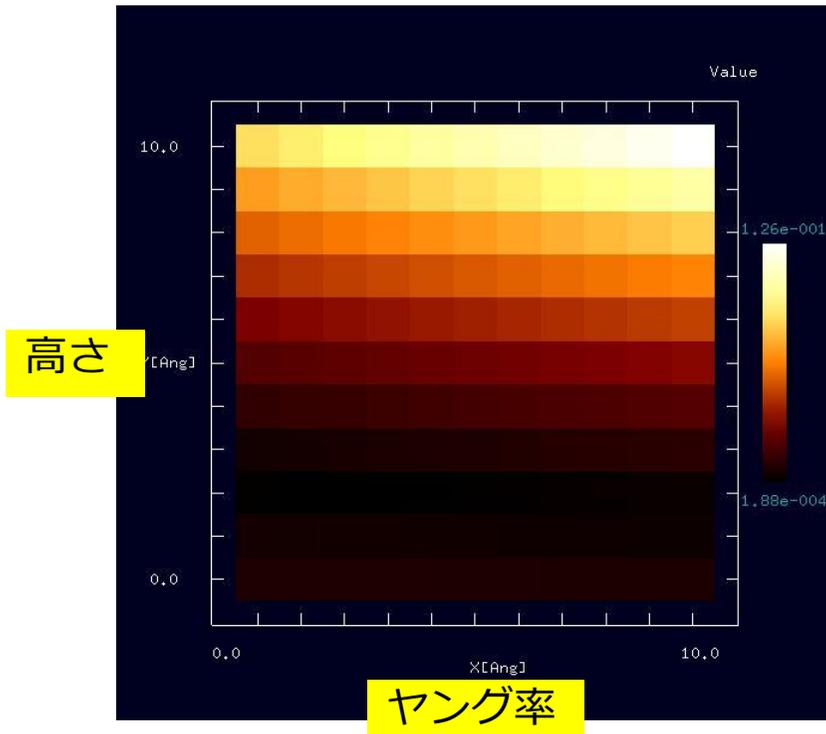
フィッティング直線： $y = ax + b$

係数 $a = -0.0122675$ ,  $b = 6.28559$

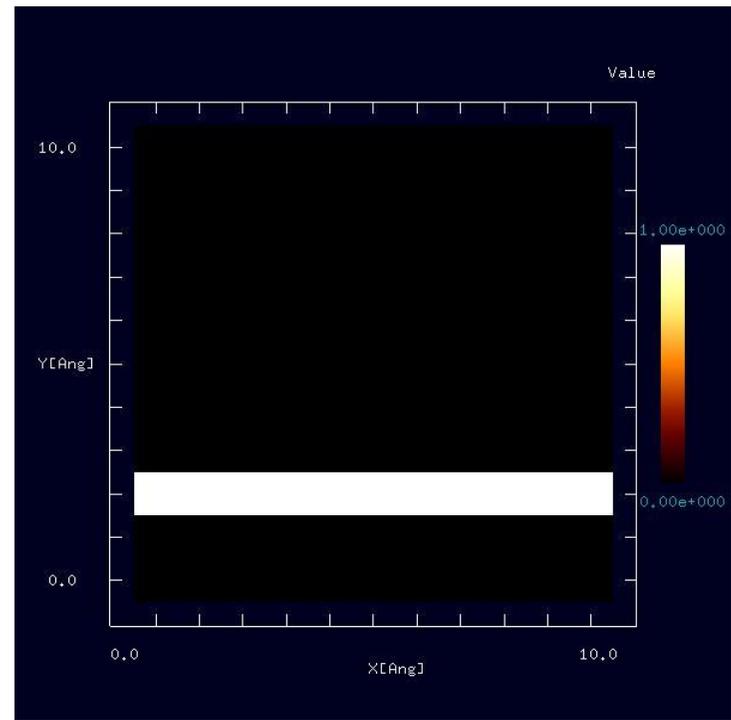
フィッティングで得られた直線を、100等分して、  
ずれ関数が最小となる点を探す



ヤング率：74.02[GPa]、試料表面の基板からの高さ：0.537755[nm]



標本点を2次元平面上で等間隔に11×11として、ずれ関数の値の分布を示したグラフ



最小二乗法で得られた直線を、11×11の区画で表した図

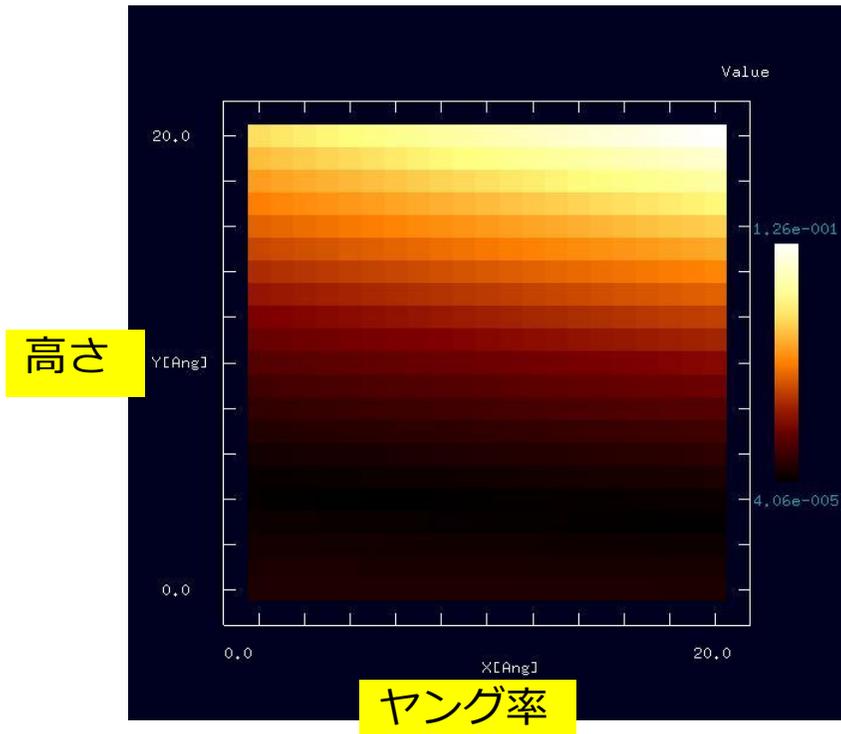
フィッティング直線： $y = ax + b$

係数 $a=-0.0288849$ ,  $b=7.51712$

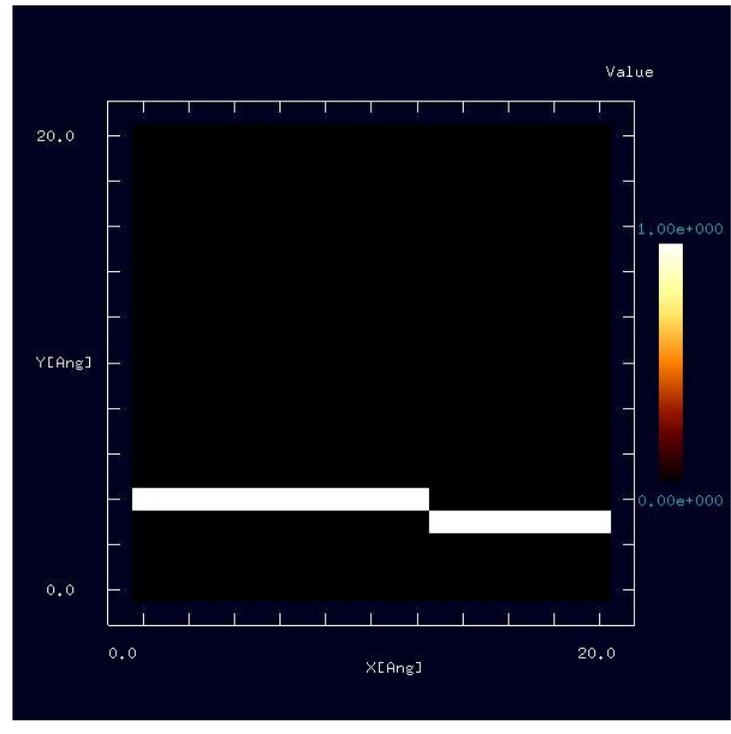
フィッティングで得られた直線を、200等分して、ずれ関数が最小となる点を探す



ヤング率：74.155[GPa]、試料表面の基板からの高さ：0.537516[nm]



標本点を2次元平面上で等間隔に21×21として、  
ずれ関数の値の分布を示したグラフ



最小二乗法で得られた直線を、  
21×21の区画で表した図

フィッティング直線： $y = ax + b$

係数 $a = -0.0645746$ ,  $b = 10.1582$

フィッティングで得られた直線を、400等分して、ずれ関数が最小となる点を探す



ヤング率：78.475[GPa]、試料表面の基板からの高さ：0.50907[nm]

#### 例題4

最適なヤング率、表面張力を求める

真空環境下を仮定

粘性抵抗：12.0[N/m]

ポアソン比：0.3

試料表面の基板からの高さ：0.1[nm]

ヤング率：80.0[GPa]

表面張力：0.25[N/m]

周波数シフトの観測値：-170.1997[Hz]

位相シフトの観測値：-0.00056303[radian]

ヤング率：69.0～92.0[GPa]

表面張力：0.11～0.42 [N/m]

として、ずれ関数を最小にする点を探す問題を考える

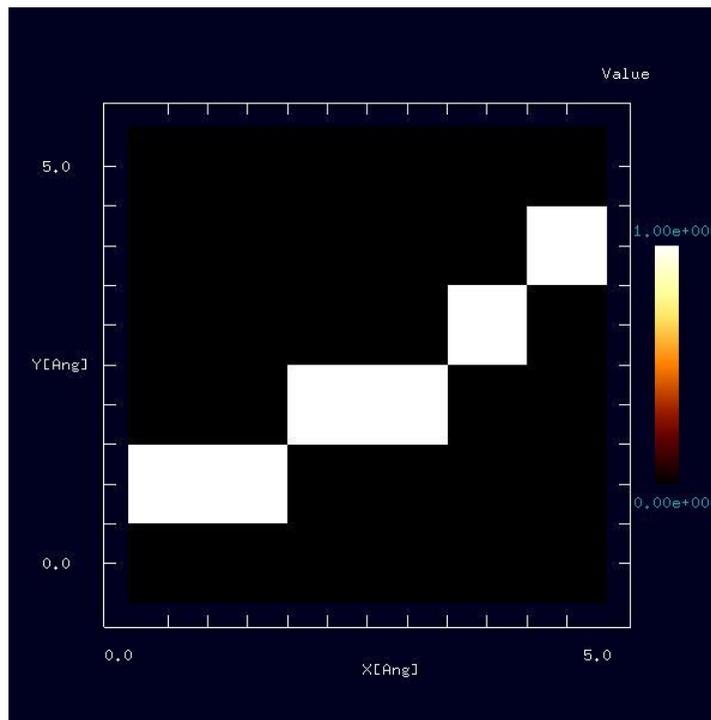
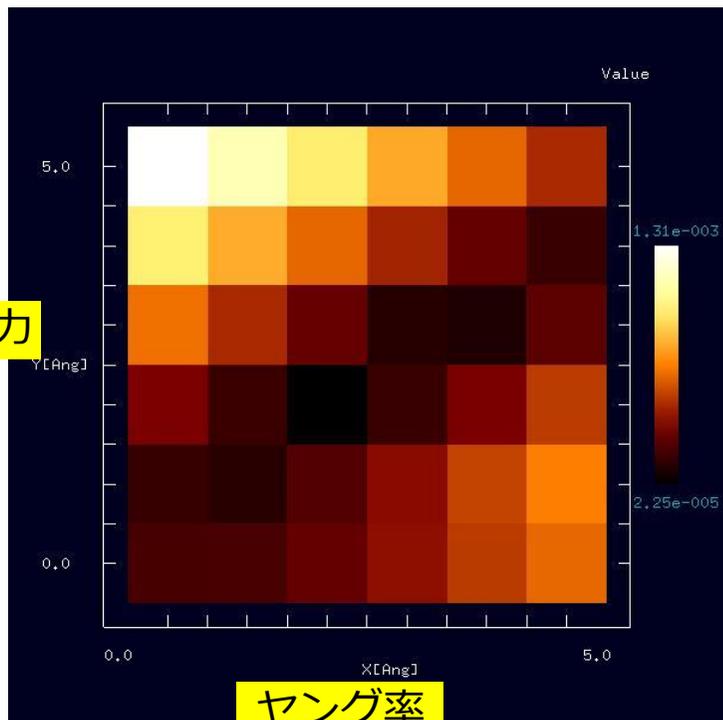
正解として、

ヤング率：80.0[GPa]

表面張力：0.25[N/m]

に近い値が得られたら合格

表面張力



標本点を2次元平面上で等間隔に6×6として、  
ずれ関数の値の分布を示したグラフ

最小二乗法で得られた直線を、  
6×6の区画で表した図

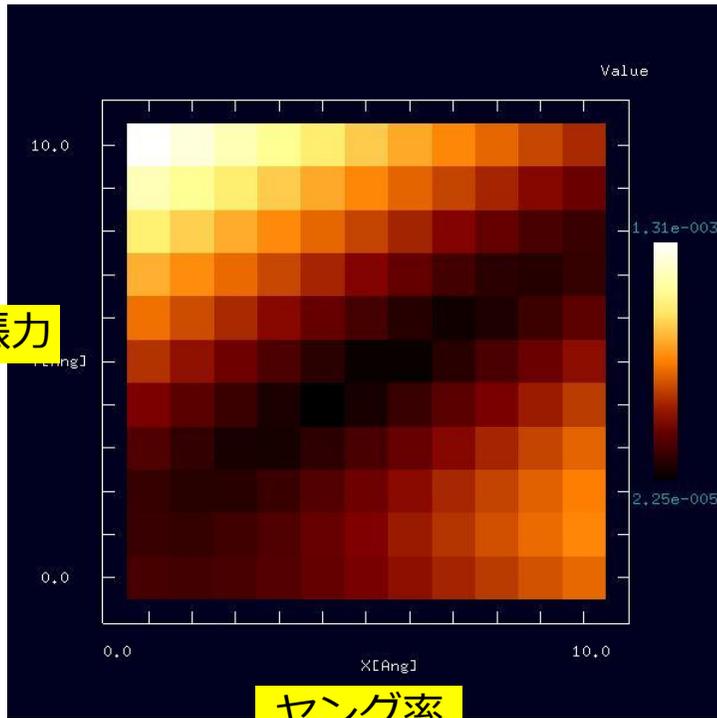
フィッティング直線： $y = ax + b$

係数 $a=0.00696994$ ,  $b=-0.312991$

フィッティングで得られた直線を、100等分して、  
ずれ関数が最小となる点を探す

→ ヤング率：79.35[GPa]、表面張力：0.240074[N/m]

表面張力



ヤング率

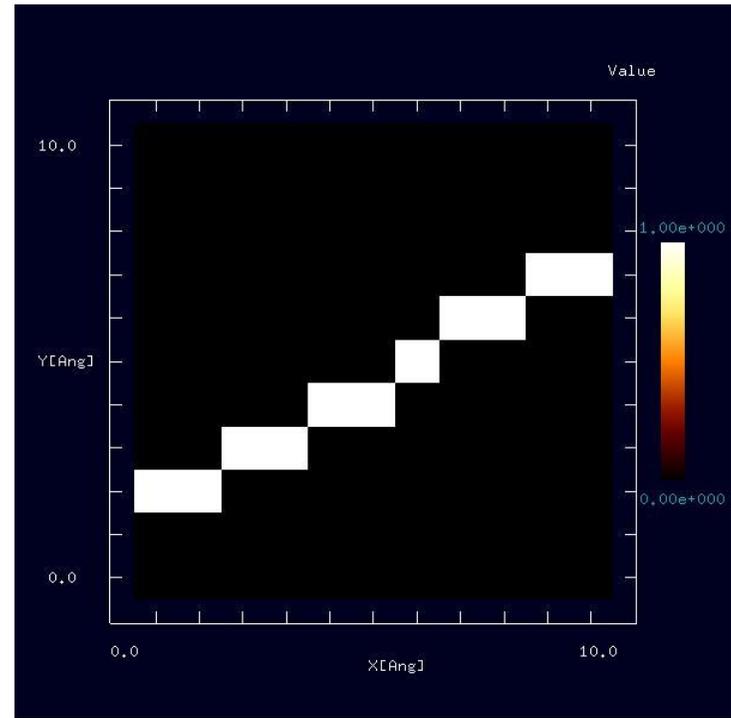
標本点を2次元平面上で等間隔に11×11として、  
ずれ関数の値の分布を示したグラフ

フィッティング直線： $y = ax + b$

係数 $a=0.00713769$ ,  $b=-0.325783$

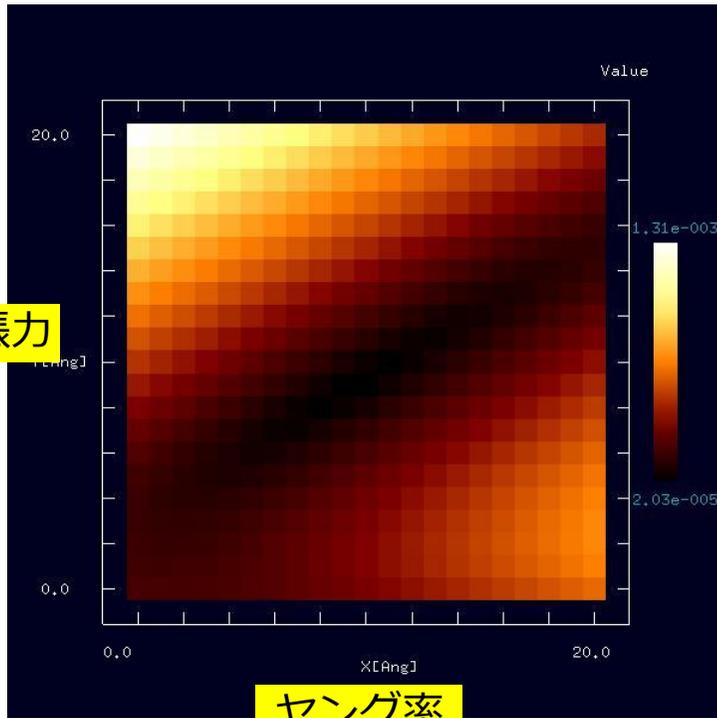
フィッティングで得られた直線を、200等分して、  
ずれ関数が最小となる点を探す

ヤング率：79.465[GPa]、表面張力：0.241413[N/m]



最小二乗法で得られた直線を、  
11×11の区画で表した図

表面張力



ヤング率

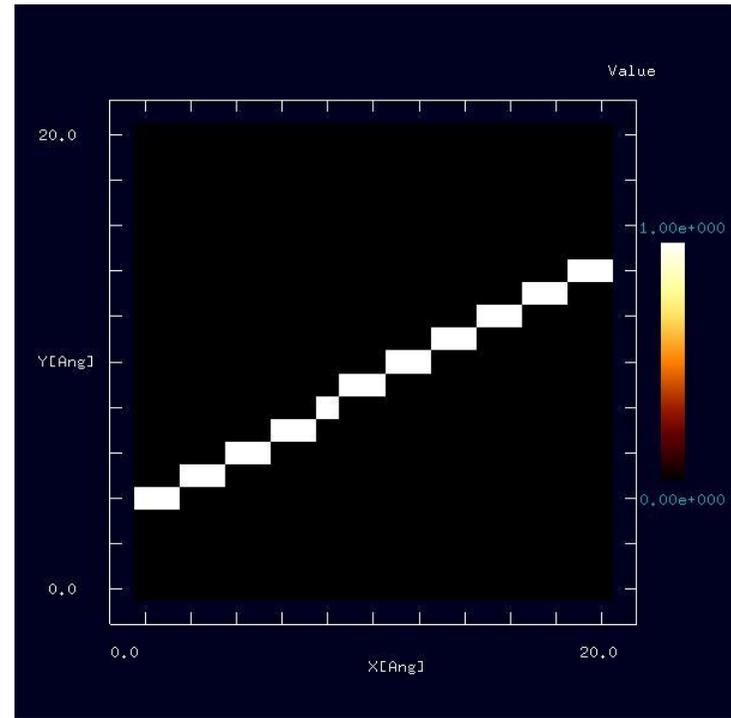
標本点を2次元平面上で等間隔に21×21として、  
ずれ関数の値の分布を示したグラフ

フィッティング直線： $y = ax + b$

係数 $a=0.00718152$ ,  $b=-0.32778$

フィッティングで得られた直線を、400等分して、  
ずれ関数が最小となる点を探す

→ ヤング率：79.6375[GPa]、表面張力：0.244138[N/m]



最小二乗法で得られた直線を、  
21×21の区画で表した図

## 例題5

最適なヤング率、試料表面の基板からの高さを求める

真空環境下を仮定

粘性抵抗：20.0[N/m]

ポアソン比：0.3

表面張力：0.5[N/m]

ヤング率：80.0[GPa]

試料表面の基板からの高さ：0.1[nm]

周波数シフトの観測値：-39.7696[Hz]

位相シフトの観測値：-0.002084433[radian]

ヤング率：66.0～93.0[GPa]

試料表面の基板からの高さ：-0.21～0.32[nm]

として、ずれ関数を最小にする点を探す問題を考える

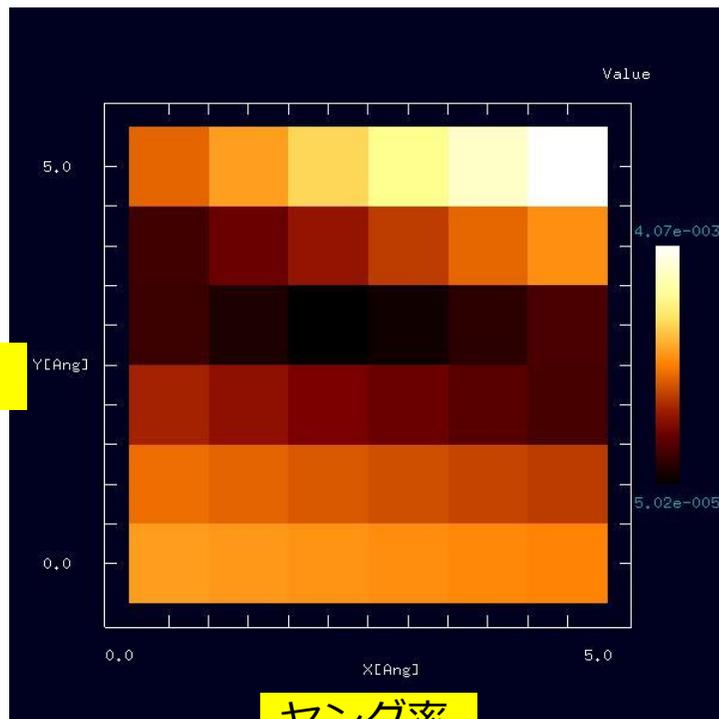
正解として、

ヤング率：80.0[GPa]

試料表面の基板からの高さ：0.1[nm]

に近い値が得られたら合格

高さ



ヤング率

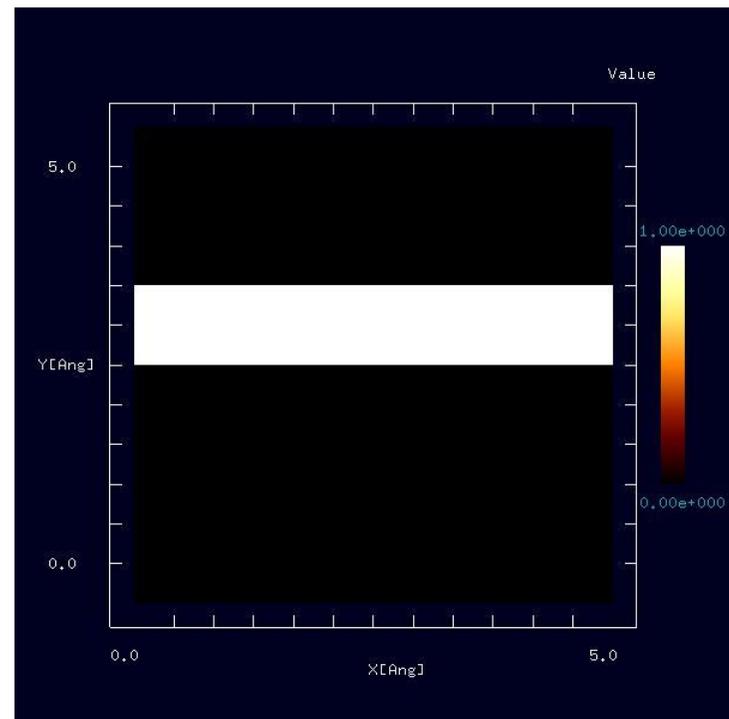
標本点を2次元平面上で等間隔に6×6として、  
ずれ関数の値の分布を示したグラフ

フィッティング直線： $y = ax + b$

係数 $a = -0.0264091$ ,  $b = 3.10113$

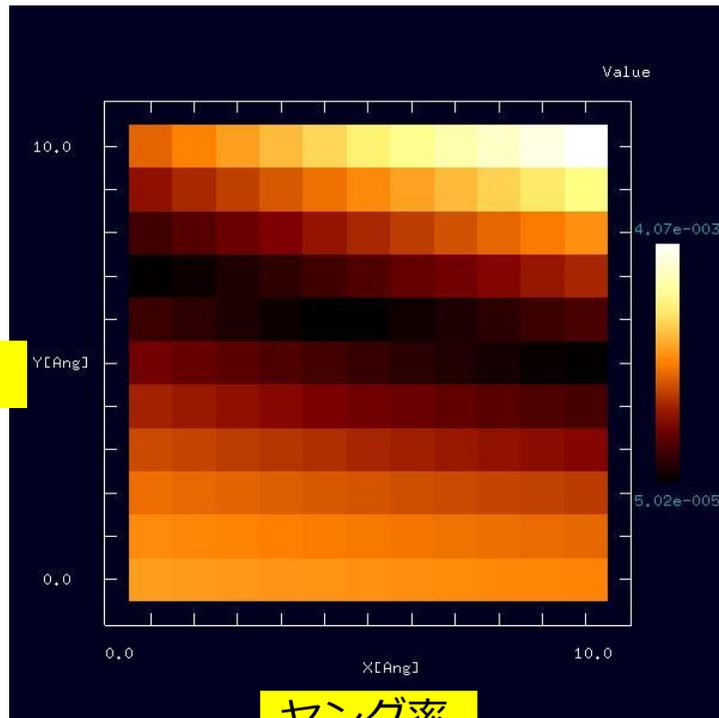
フィッティングで得られた直線を、100等分して、  
ずれ関数が最小となる点を探す

ヤング率：80.85[GPa]、試料表面の基板からの高さ：0.0965959[nm]



最小二乗法で得られた直線を、  
6×6の区画で表した図

高さ



ヤング率

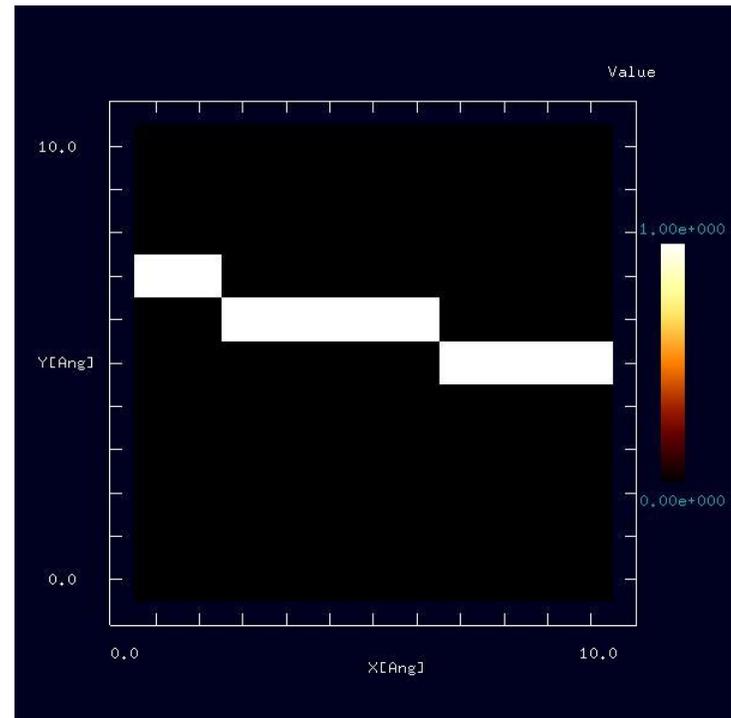
標本点を2次元平面上で等間隔に11×11として、  
ずれ関数の値の分布を示したグラフ

フィッティング直線： $y = ax + b$

係数 $a = -0.0382662$ ,  $b = 4.05075$

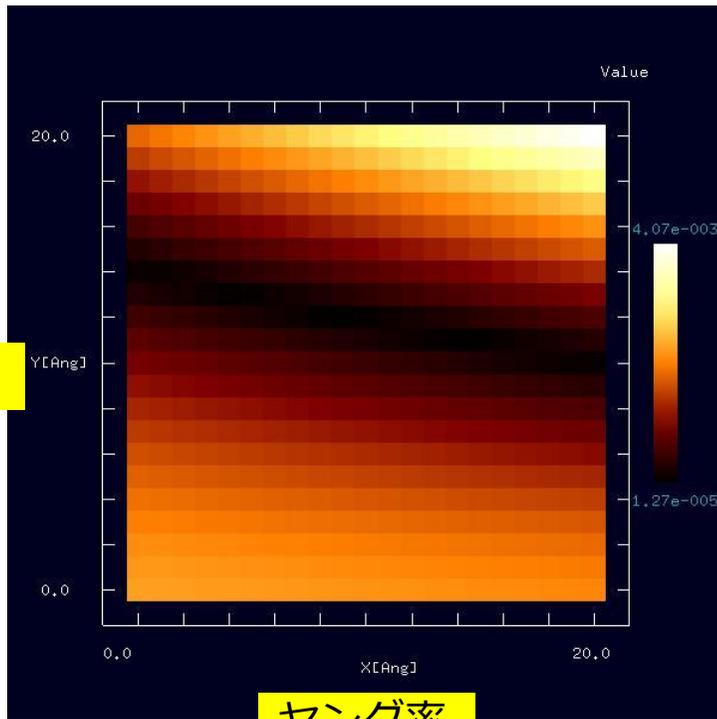
フィッティングで得られた直線を、200等分して、  
ずれ関数が最小となる点を探す

→ ヤング率：79.905[GPa]、試料表面の基板からの高さ：0.0993086[nm]



最小二乗法で得られた直線を、  
11×11の区画で表した図

高さ



ヤング率

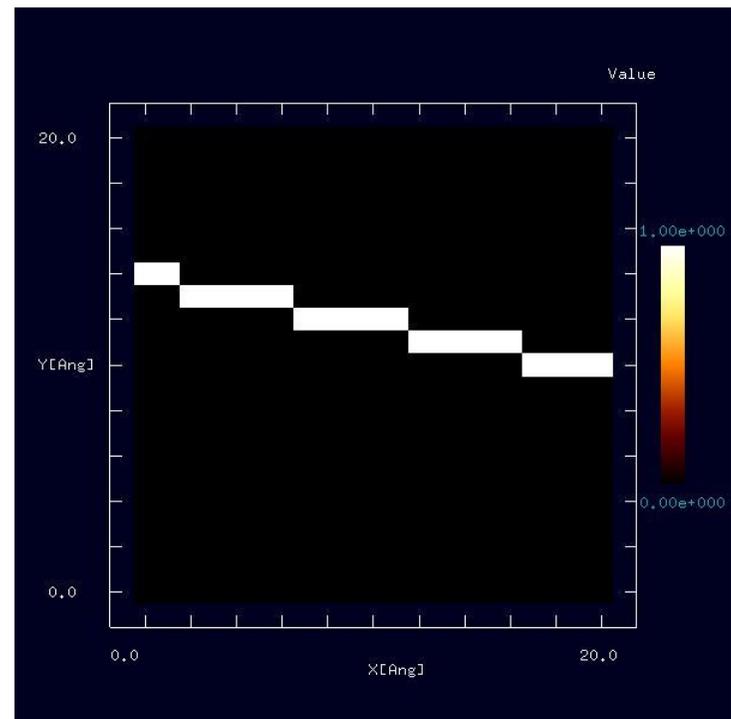
標本点を2次元平面上で等間隔に21×21として、  
ずれ関数の値の分布を示したグラフ

フィッティング直線： $y = ax + b$

係数 $a=-0.03789$ ,  $b=4.03367$

フィッティングで得られた直線を、400等分して、  
ずれ関数が最小となる点を探す

→ ヤング率：80.5125[GPa]、試料表面の基板からの高さ：0.0983049 [nm]



最小二乗法で得られた直線を、  
21×21の区画で表した図

## 例題6

最適な表面張力、試料表面の基板からの高さを求める

真空環境下を仮定

粘性抵抗：11.0[N/m]

ポアソン比：0.3

ヤング率：80.0[GPa]

表面張力：0.5[N/m]

試料表面の基板からの高さ：0.5[nm]

周波数シフトの観測値：-702.8858[Hz]

位相シフトの観測値：-0.00271521[radian]

表面張力：0.1～2.2[N/m]

試料表面の基板からの高さ：-0.2～2.7[nm]

として、ずれ関数を最小にする点を探す問題を考える

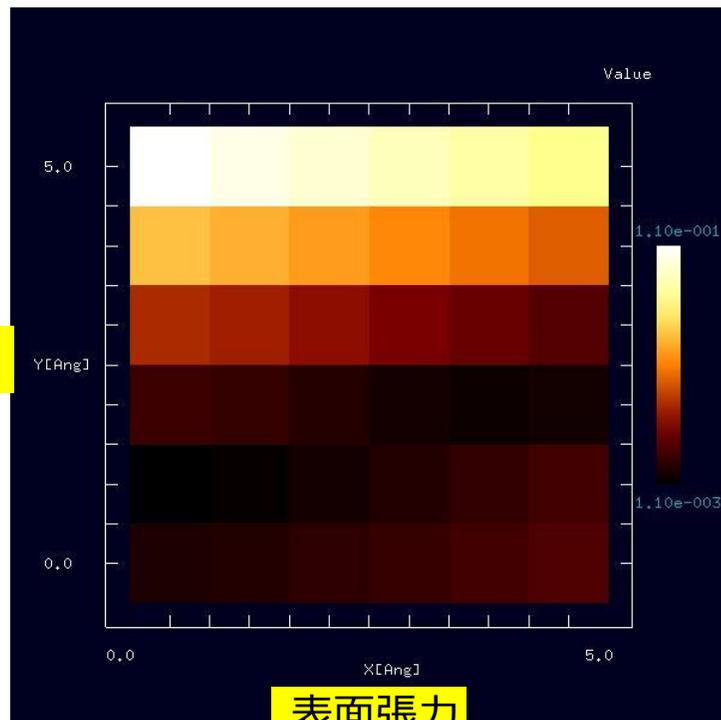
正解として、

表面張力：0.5[N/m]

試料表面の基板からの高さ：0.5[nm]

に近い値が得られたら合格

高さ



表面張力

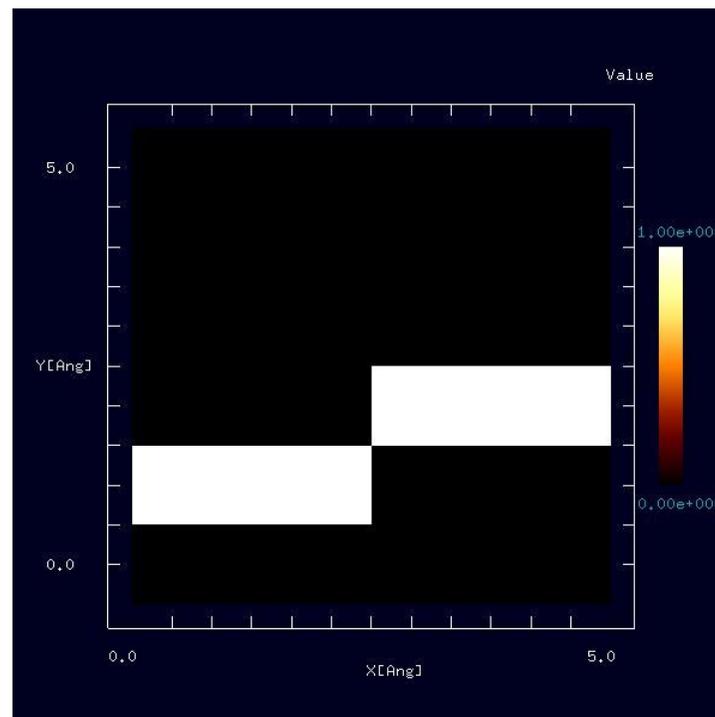
標本点を2次元平面上で等間隔に6×6として、  
ずれ関数の値の分布を示したグラフ

フィッティング直線： $y = ax + b$

係数 $a=2.55876$ ,  $b=3.27866$

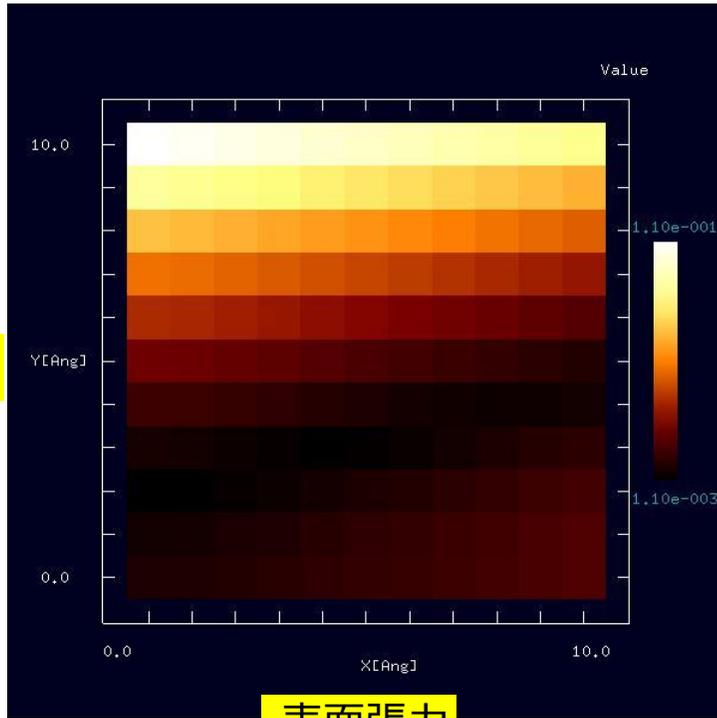
フィッティングで得られた直線を、100等分して、  
ずれ関数が最小となる点を探す

表面張力：0.373[N/m]、試料表面の基板からの高さ：0.423308[nm]



最小二乗法で得られた直線を、  
6×6の区画で表した図

高さ



表面張力

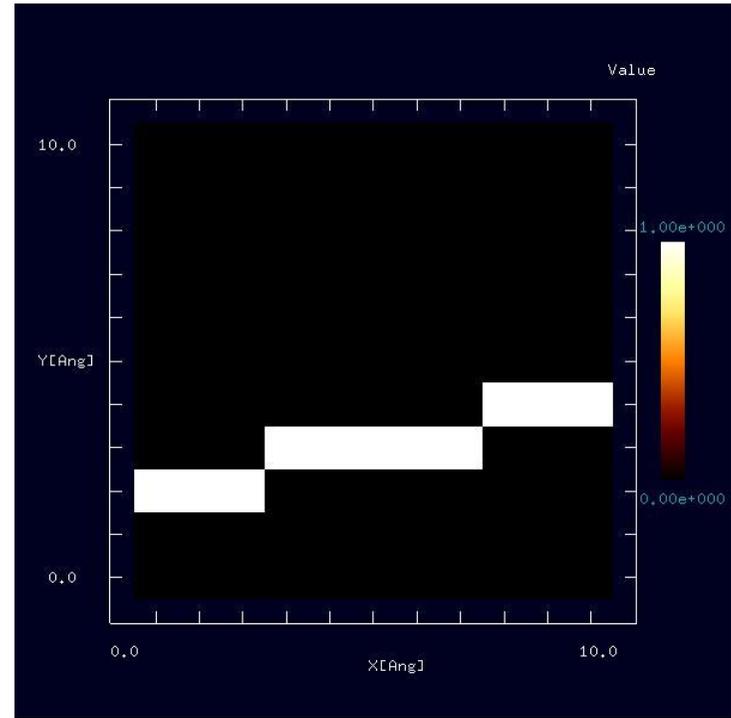
標本点を2次元平面上で等間隔に11×11として、  
ずれ関数の値の分布を示したグラフ

フィッティング直線： $y = ax + b$

係数 $a=2.82603$ ,  $b=3.2859$

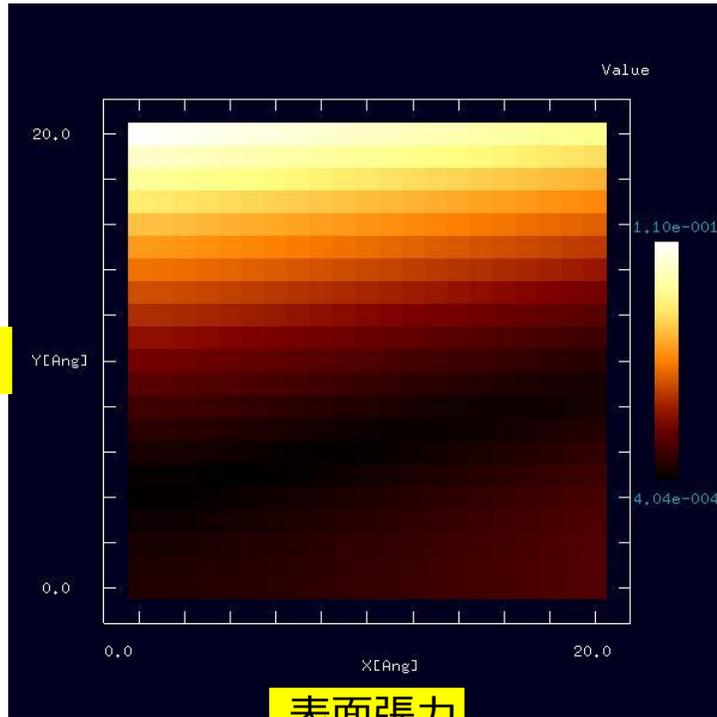
フィッティングで得られた直線を、200等分して、  
ずれ関数が最小となる点を探す

表面張力：0.4465[N/m]、試料表面の基板からの高さ：0.454772[nm]



最小二乗法で得られた直線を、  
11×11の区画で表した図

高さ



表面張力

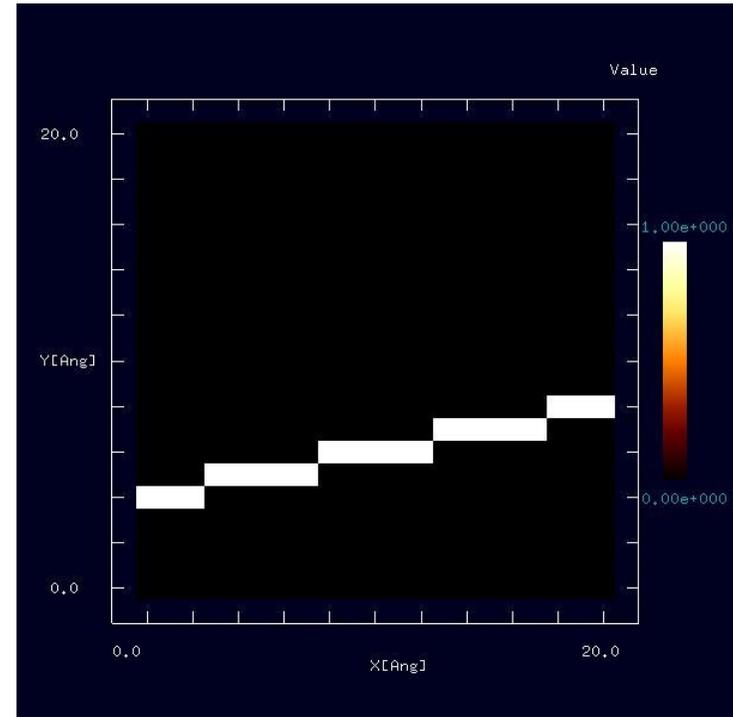
標本点を2次元平面上で等間隔に21×21として、  
ずれ関数の値の分布を示したグラフ

フィッティング直線： $y = ax + b$

係数 $a=2.67027$ ,  $b=3.59619$

フィッティングで得られた直線を、400等分して、  
ずれ関数が最小となる点を探す

表面張力：0.48325[N/m]、  
試料表面の基板からの高さ：0.48866[nm]



最小二乗法で得られた直線を、  
21×21の区画で表した図

## 例題7

最適な表面張力、試料表面の基板からの高さを求める

液中環境下を仮定

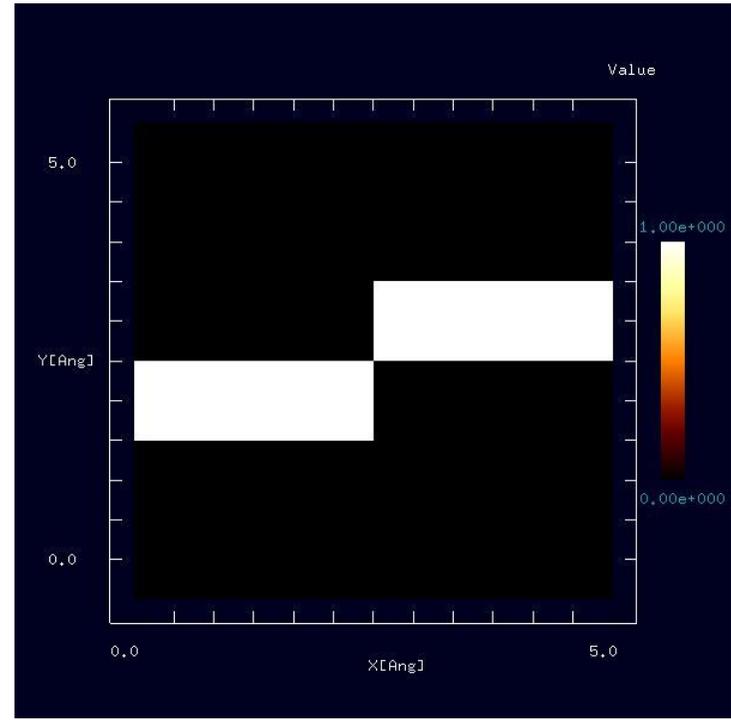
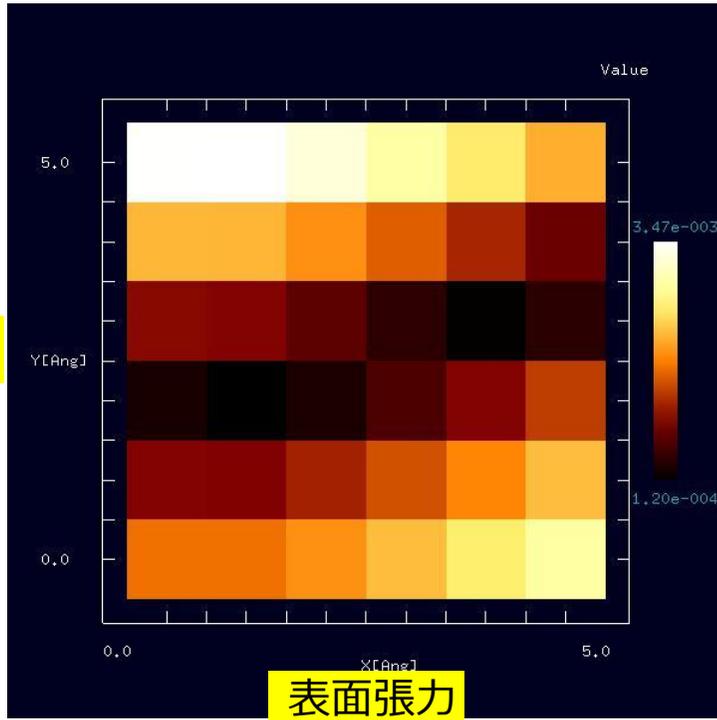
粘性抵抗：12.0[N/m]  
ポアソン比：0.3  
ヤング率：80.0[GPa]  
表面張力：0.25[N/m]  
試料表面の基板からの高さ：0.1[nm]  
周波数シフトの観測値：-221.8349[Hz]  
位相シフトの観測値：0.0004840706[radian]

表面張力：0.11~0.43[N/m]  
試料表面の基板からの高さ：-0.07~0.29[nm]  
として、ずれ関数を最小にする点を探す問題を考える

正解として、  
表面張力：0.25[N/m]  
試料表面の基板からの高さ：0.1[nm]  
に近い値が得られたら合格

液中環境パラメータ  
動粘性率：0.25E-6[m<sup>2</sup>/s]  
密度：200[kg/m<sup>3</sup>]

高さ



標本点を2次元平面上で等間隔に6×6として、  
ずれ関数の値の分布を示したグラフ

最小二乗法で得られた直線を、  
6×6の区画で表した図

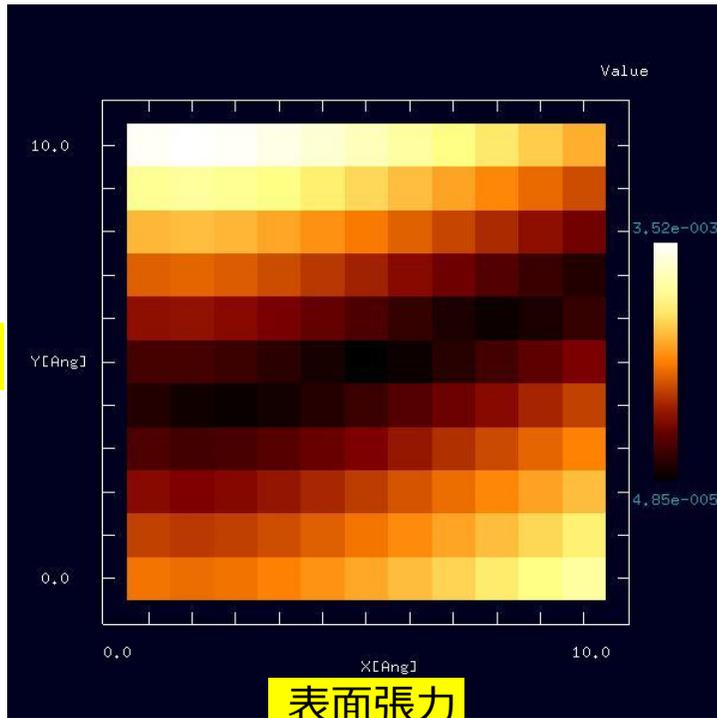
フィッティング直線： $y = ax + b$

係数 $a=3.26185$ ,  $b=0.203349$

フィッティングで得られた直線を、100等分して、  
ずれ関数が最小となる点を探す

表面張力：0.2508[N/m]、試料表面の基板からの高さ：0.102142[nm]

高さ



表面張力

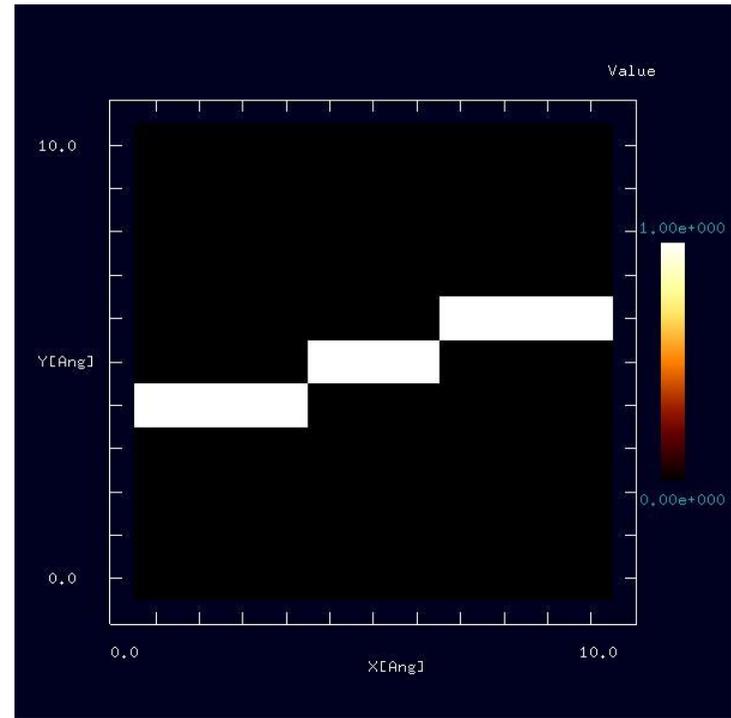
標本点を2次元平面上で等間隔に $11 \times 11$ として、ずれ関数の値の分布を示したグラフ

フィッティング直線： $y = ax + b$

係数 $a=3.12172$ ,  $b=0.245788$

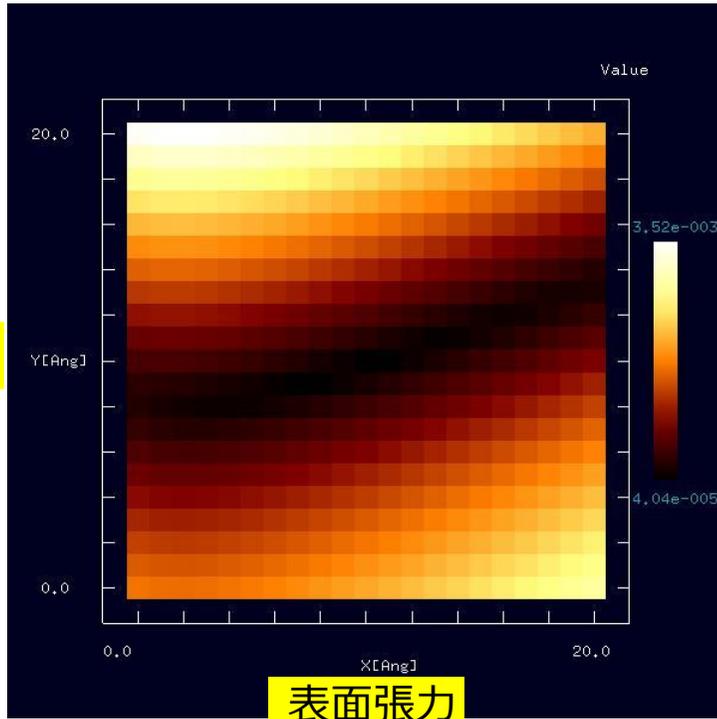
フィッティングで得られた直線を、200等分して、ずれ関数が最小となる点を探す

表面張力： $0.2684$ [N/m]、試料表面の基板からの高さ： $0.108366$ [nm]



最小二乗法で得られた直線を、 $11 \times 11$ の区画で表した図

高さ



表面張力

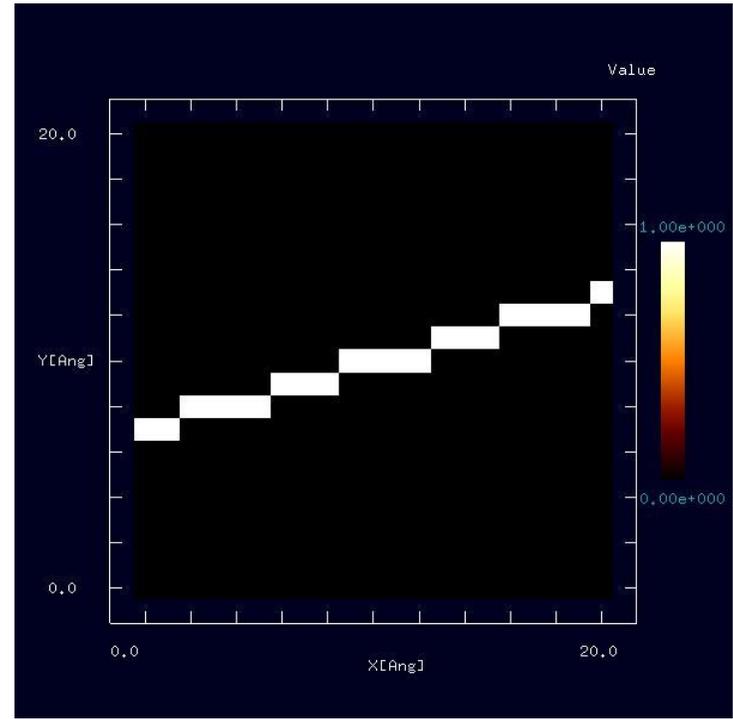
標本点を2次元平面上で等間隔に $21 \times 21$ として、 $z$ 関数の値の分布を示したグラフ

フィッティング直線： $y = ax + b$

係数 $a=3.12627$ ,  $b=0.23324$

フィッティングで得られた直線を、400等分して、 $z$ 関数が最小となる点を探す

表面張力：0.2596[N/m]、試料表面の基板からの高さ：0.104482[nm]



最小二乗法で得られた直線を、 $21 \times 21$ の区画で表した図

## 例題8

最適なヤング率、表面張力を求める

液中環境下を仮定

粘性抵抗：12.0[N/m]

ポアソン比：0.3

試料表面の基板からの高さ：0.1[nm]

ヤング率：80.0[GPa]

表面張力：0.25[N/m]

周波数シフトの観測値：-221.8349[Hz]

位相シフトの観測値：0.0004840706[radian]

ヤング率：69.0～92.0[GPa]

表面張力：0.11～0.43[N/m]

として、ずれ関数を最小にする点を探す問題を考える

正解として、

ヤング率：80.0[GPa]

表面張力：0.25[N/m]

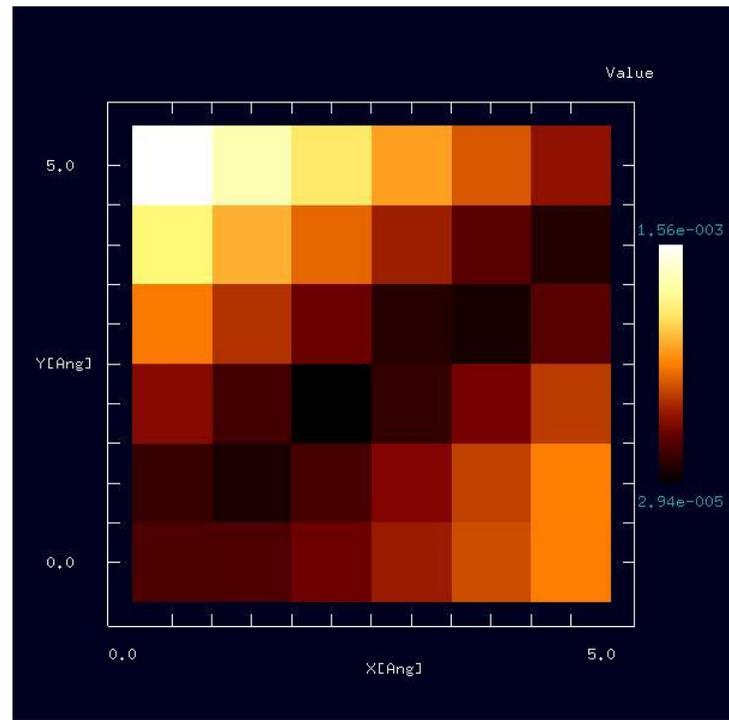
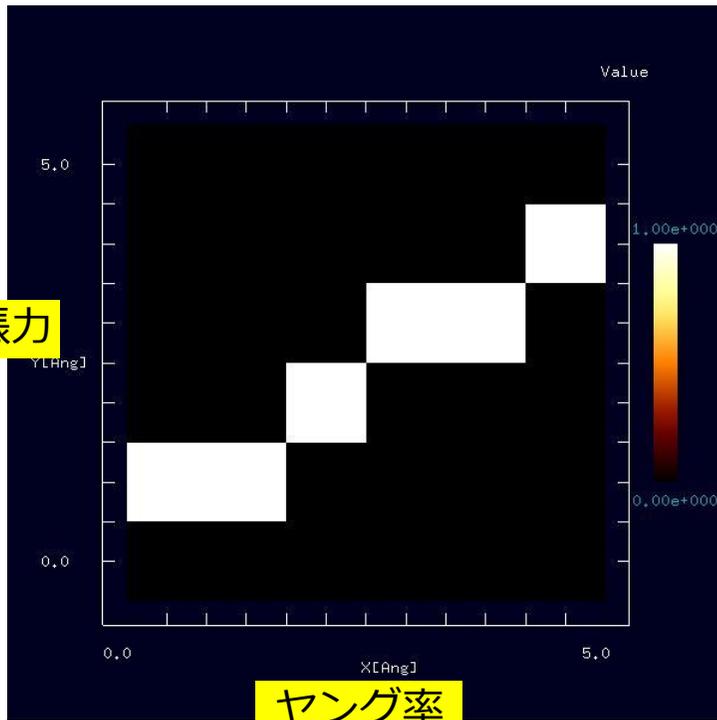
に近い値が得られたら合格

液中環境パラメータ

動粘性率：0.25E-6[m<sup>2</sup>/s]

密度：200[kg/m<sup>3</sup>]

表面張力



標本点を2次元平面上で等間隔に6×6として、  
ずれ関数の値の分布を示したグラフ

最小二乗法で得られた直線を、  
6×6の区画で表した図

フィッティング直線： $y = ax + b$

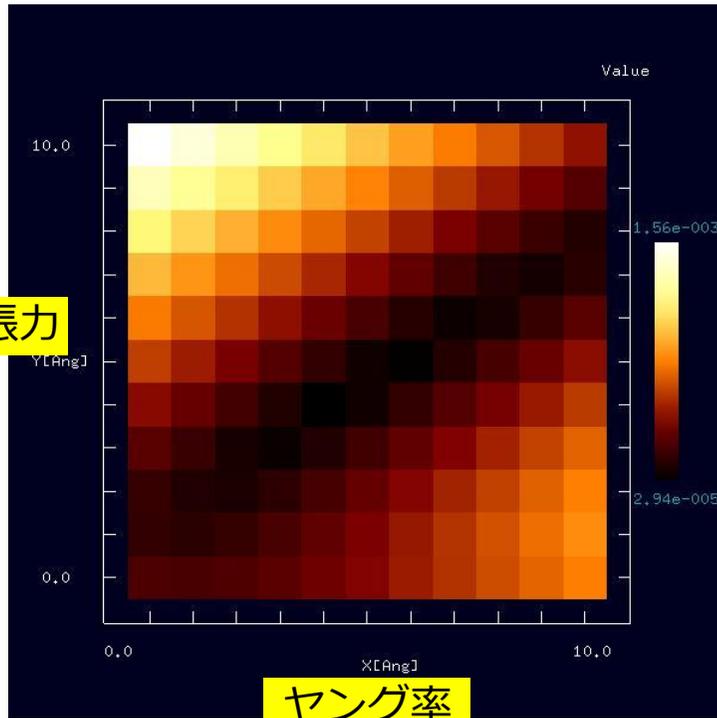
係数 $a=0.00787027$ ,  $b=-0.380466$

フィッティングで得られた直線を、100等分して、  
ずれ関数が最小となる点を探す



ヤング率：79.81[GPa]、表面張力：0.24766[N/m]

表面張力



ヤング率

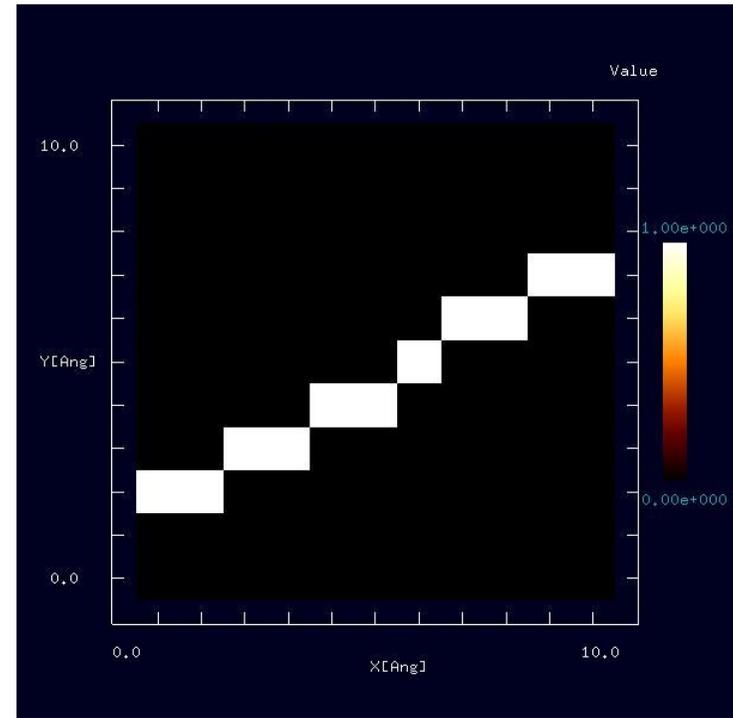
標本点を2次元平面上で等間隔に11×11として、  
ずれ関数の値の分布を示したグラフ

フィッティング直線： $y = ax + b$

係数 $a=0.0080779$ ,  $b=-0.398524$

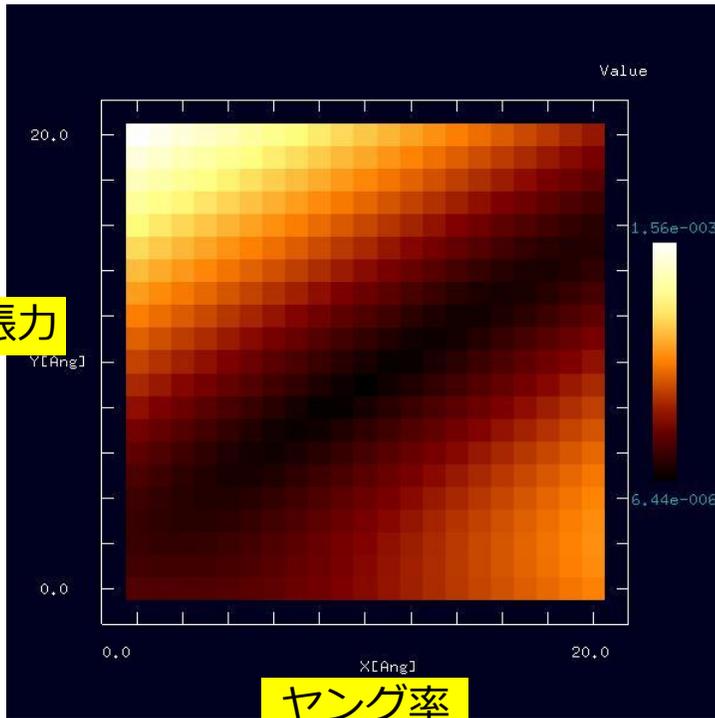
フィッティングで得られた直線を、200等分して、  
ずれ関数が最小となる点を探す

→ ヤング率：79.81[GPa]、表面張力：0.246174[N/m]



最小二乗法で得られた直線を、  
11×11の区画で表した図

表面張力



ヤング率

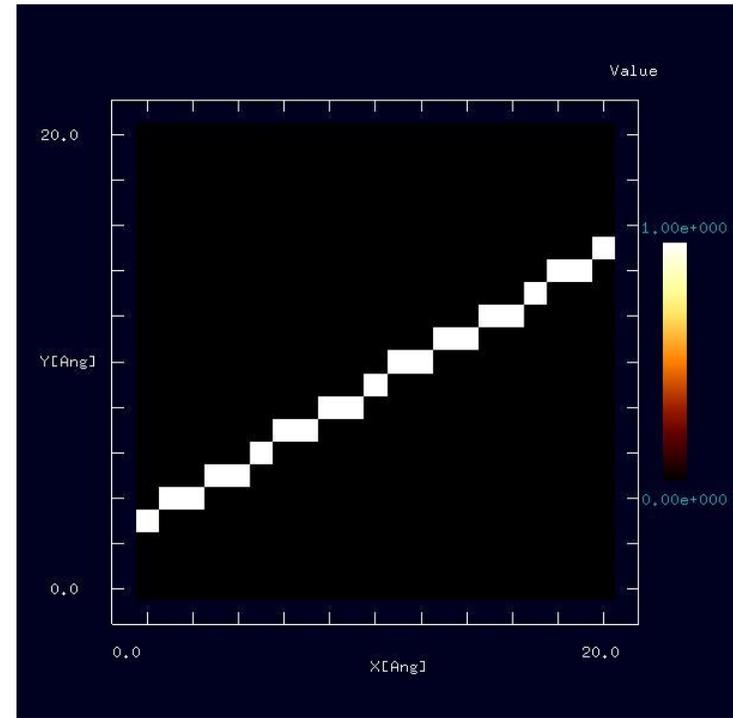
標本点を2次元平面上で等間隔に21×21として、  
ずれ関数の値の分布を示したグラフ

フィッティング直線： $y = ax + b$

係数 $a=0.00817355$ ,  $b=-0.404918$

フィッティングで得られた直線を、400等分して、  
ずれ関数が最小となる点を探す

→ ヤング率：79.925[GPa]、表面張力：0.248352[N/m]



最小二乗法で得られた直線を、  
21×21の区画で表した図

## 例題9

最適なヤング率、試料表面の基板からの高さを求める

液中環境下を仮定

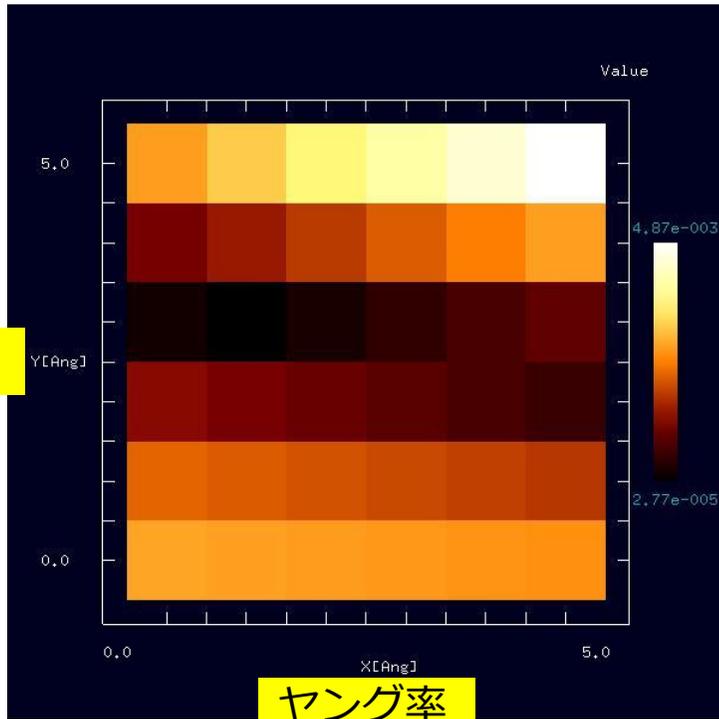
粘性抵抗：12.0[N/m]  
ポアソン比：0.3  
表面張力：0.25[N/m]  
ヤング率：80.0[GPa]  
試料表面の基板からの高さ：0.1[nm]  
周波数シフトの観測値：-221.8349[Hz]  
位相シフトの観測値：0.0004840706[radian]

ヤング率：69.0～92.0[GPa]  
試料表面の基板からの高さ：-0.17～0.32[nm]  
として、ずれ関数を最小にする点を探す問題を考える

正解として、  
ヤング率：80.0[GPa]  
試料表面の基板からの高さ：0.1[nm]  
に近い値が得られたら合格

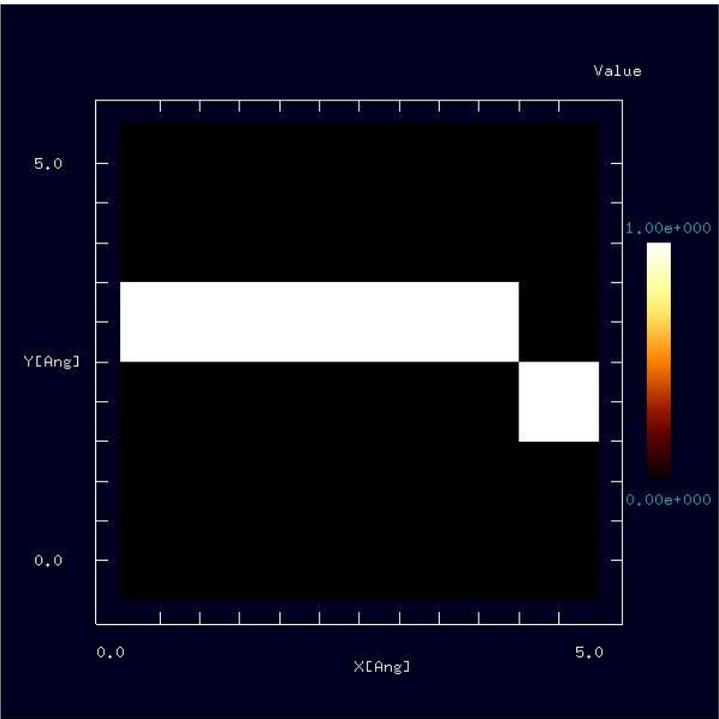
液中環境パラメータ  
動粘性率：0.25E-6[m<sup>2</sup>/s]  
密度：200[kg/m<sup>3</sup>]

高さ



ヤング率

標本点を2次元平面上で等間隔に6×6として、  
ずれ関数の値の分布を示したグラフ



最小二乗法で得られた直線を、  
6×6の区画で表した図

フィッティング直線： $y = ax + b$

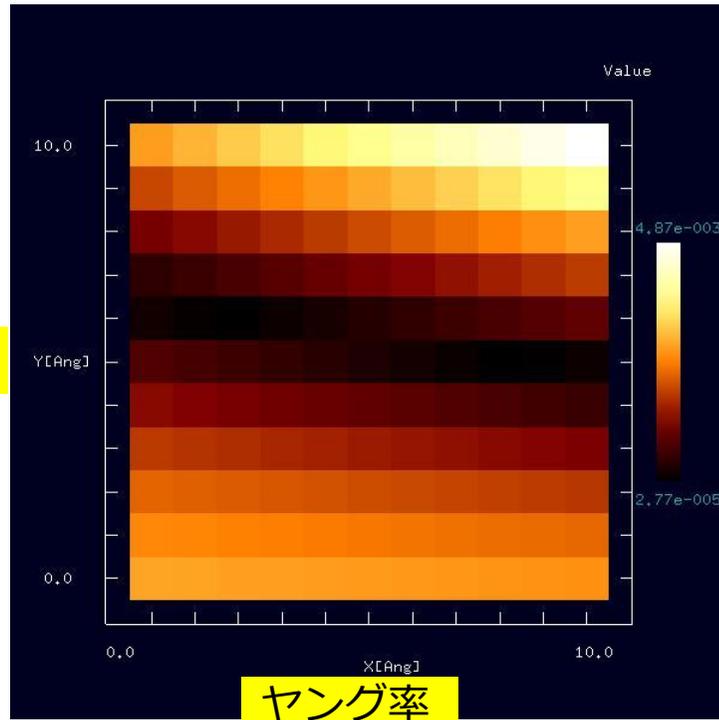
係数 $a = -0.0324468$ ,  $b = 3.62404$

フィッティングで得られた直線を、100等分して、  
ずれ関数が最小となる点を探す



ヤング率：70.84[GPa]、  
試料表面の基板からの高さ：0.132551[nm]

高さ



ヤング率

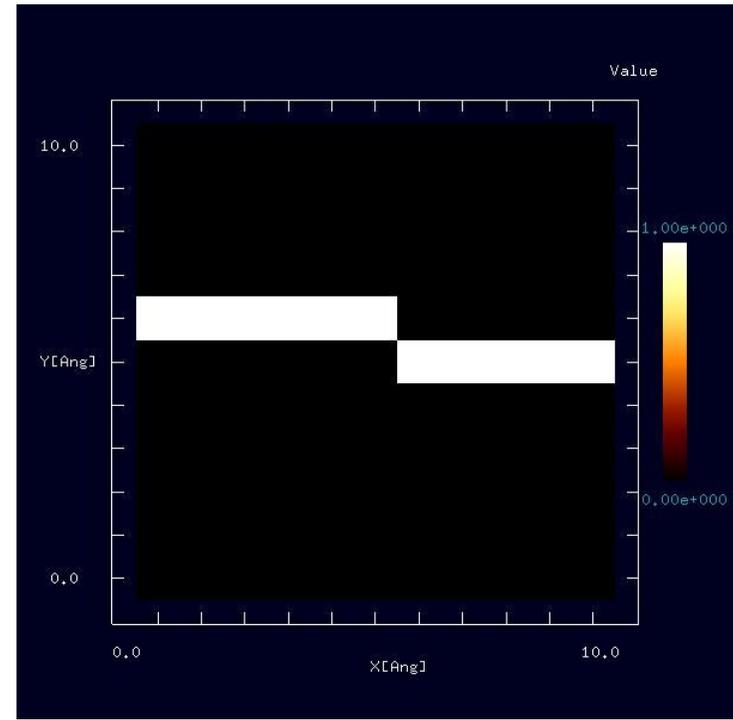
標本点を2次元平面上で等間隔に11×11として、  
ずれ関数の値の分布を示したグラフ

フィッティング直線： $y = ax + b$

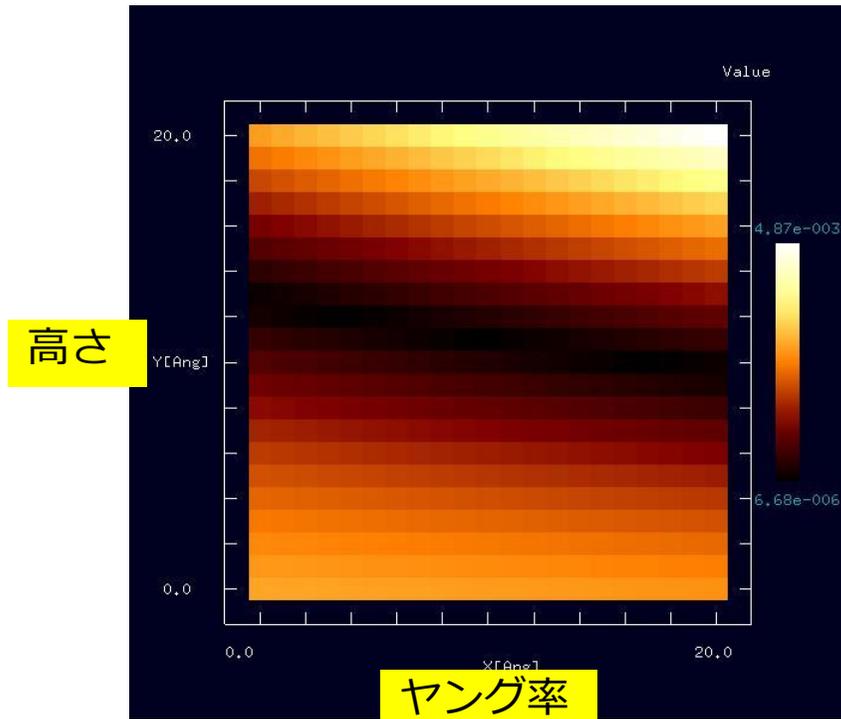
係数 $a = -0.0320542$ ,  $b = 3.58204$

フィッティングで得られた直線を、200等分して、  
ずれ関数が最小となる点を探す

→ ヤング率：72.795[GPa]、試料表面の基板からの高さ：0.124865[nm]



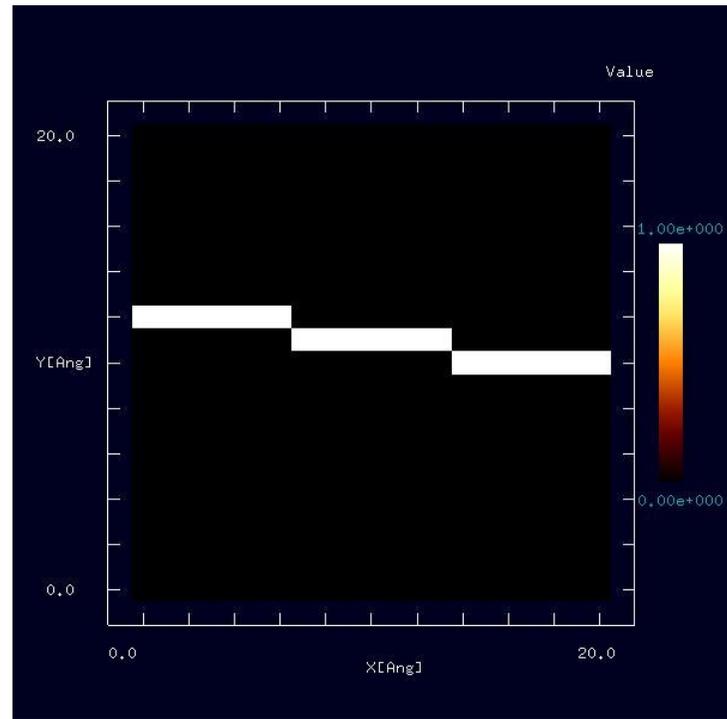
最小二乗法で得られた直線を、  
11×11の区画で表した図



標本点を2次元平面上で等間隔に21×21として、ずれ関数の値の分布を示したグラフ

フィッティング直線： $y = ax + b$

係数 $a = -0.0306644$ ,  $b = 3.46385$



最小二乗法で得られた直線を、21×21の区画で表した図

フィッティングで得られた直線を、400等分して、ずれ関数が最小となる点を探す



ヤング率：75.785[GPa]、試料表面の基板からの高さ：0.113995[nm]