

LiqAFM逆問題ソルバー経過報告

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

ω_0 : カンチレバーの共鳴振動周波数

Φ : シミュレーション計算で得た位相シフト

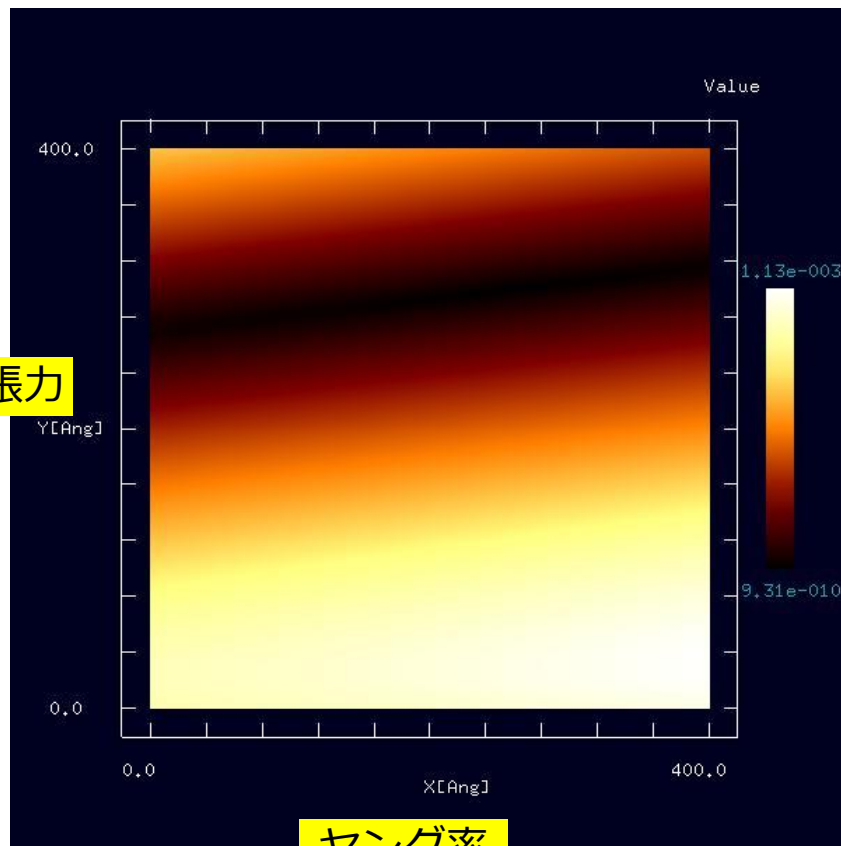
Φ_{obs} : 観測値として得られた位相シフト

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

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

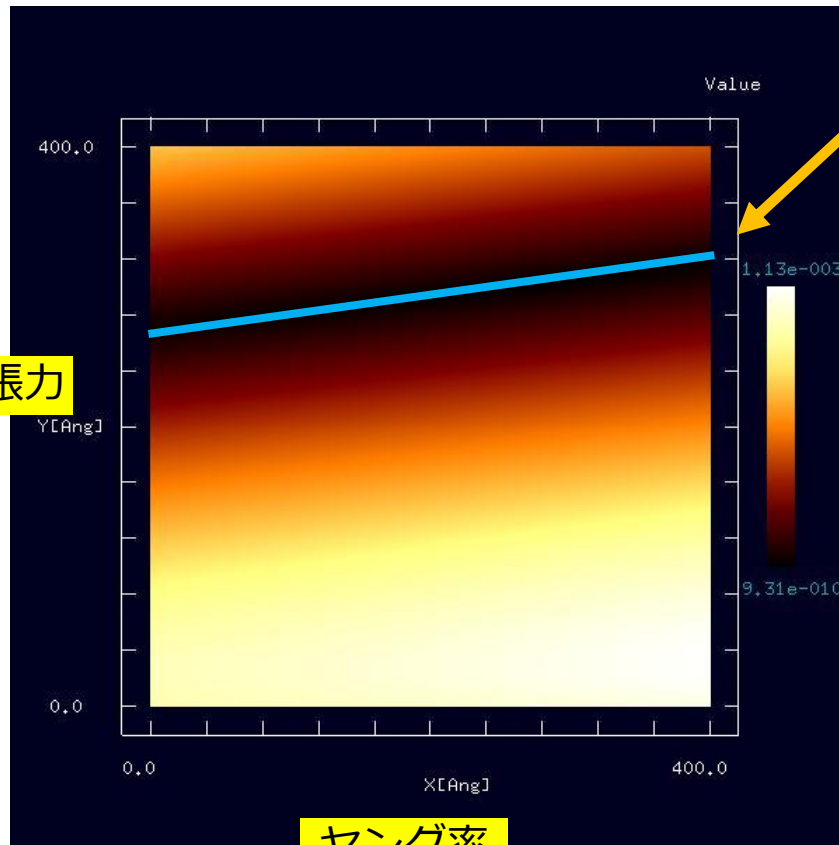


これは、ずれ関数が局所的に最小となる点の集合が、2次元パラメータ平面上で、直線状に分布することが経験的に分かっているからである

(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



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

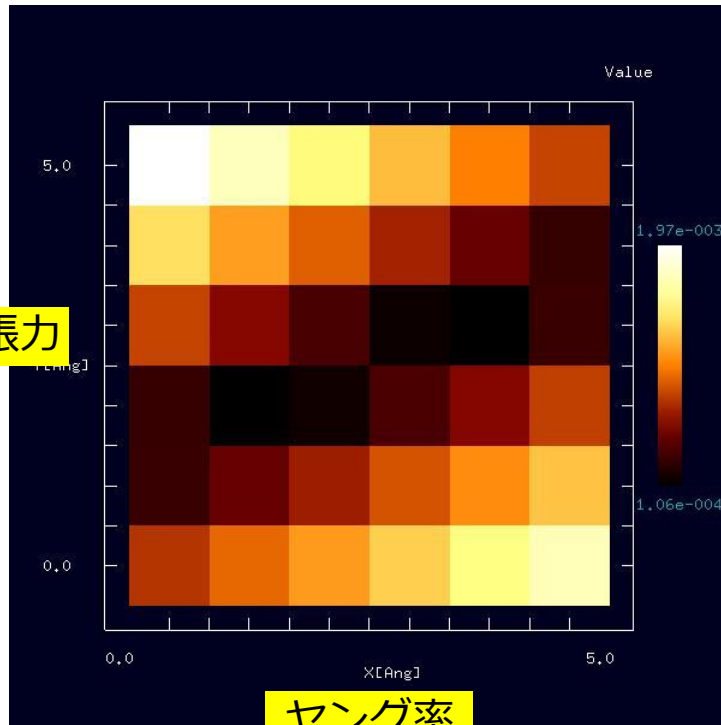
正解として、

ヤング率：80.0[GPa]

表面張力：0.5[N/m]

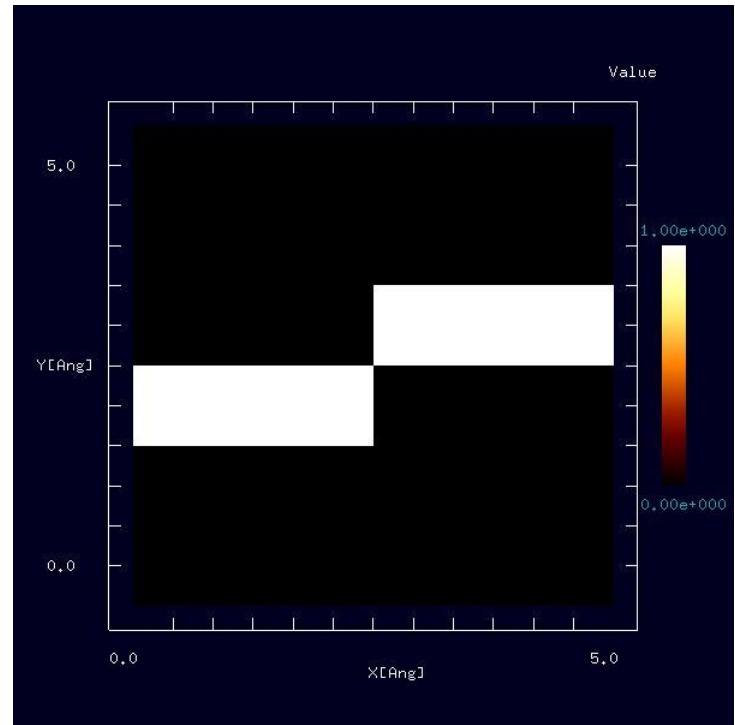
に近い値が得られたら合格

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： $y = ax + b$

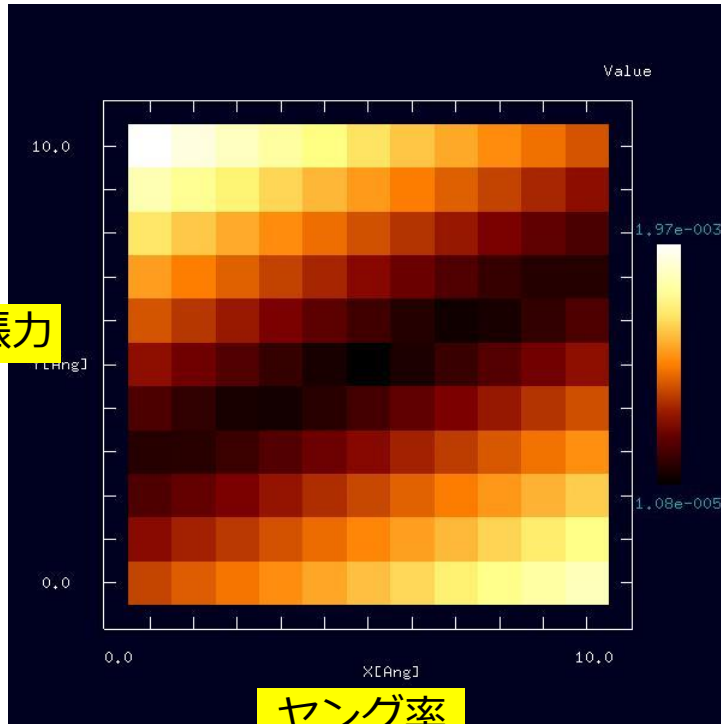
係数 $a=0.00602018$, $b=0.016659$

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

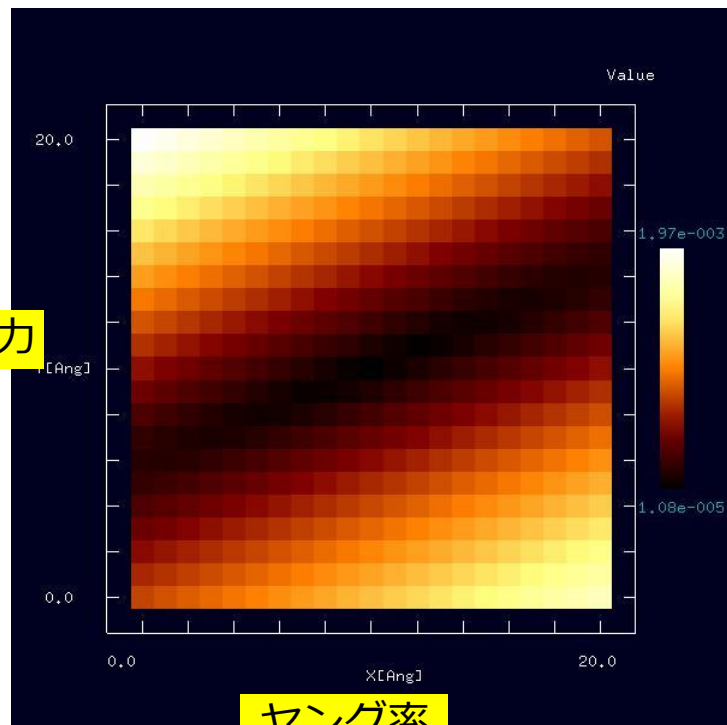
フィッティング直線： $y = ax + b$

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

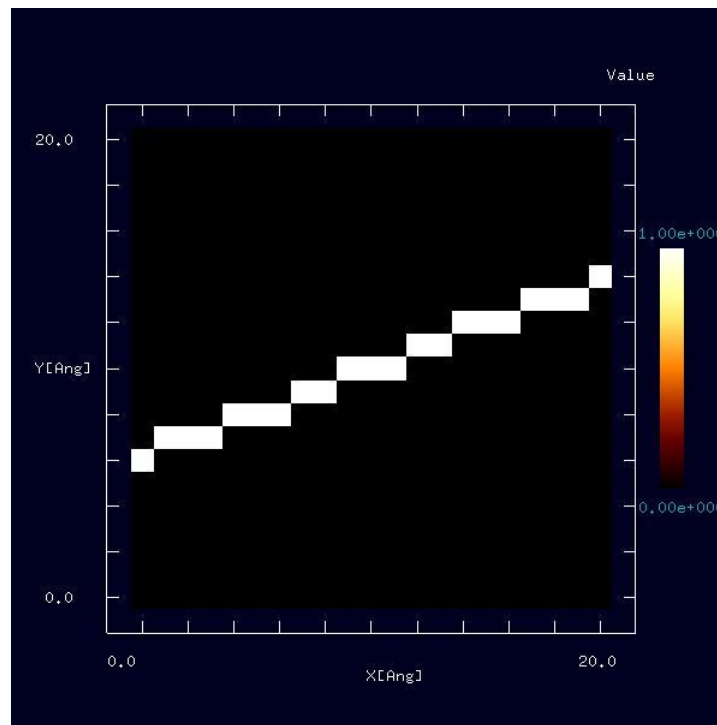
標本点を2次元平面上で等間隔に21×21として、
ずれ関数の値の分布を示したグラフ

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

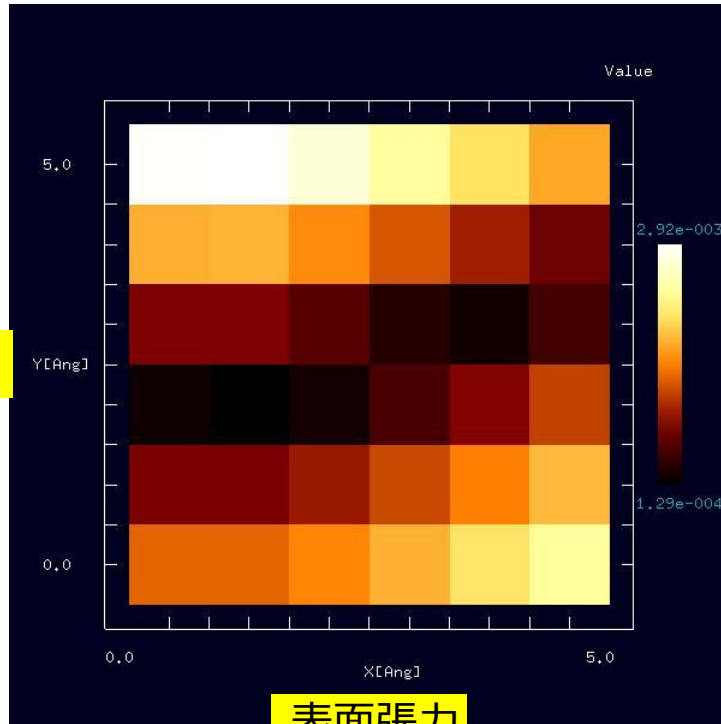
正解として、

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

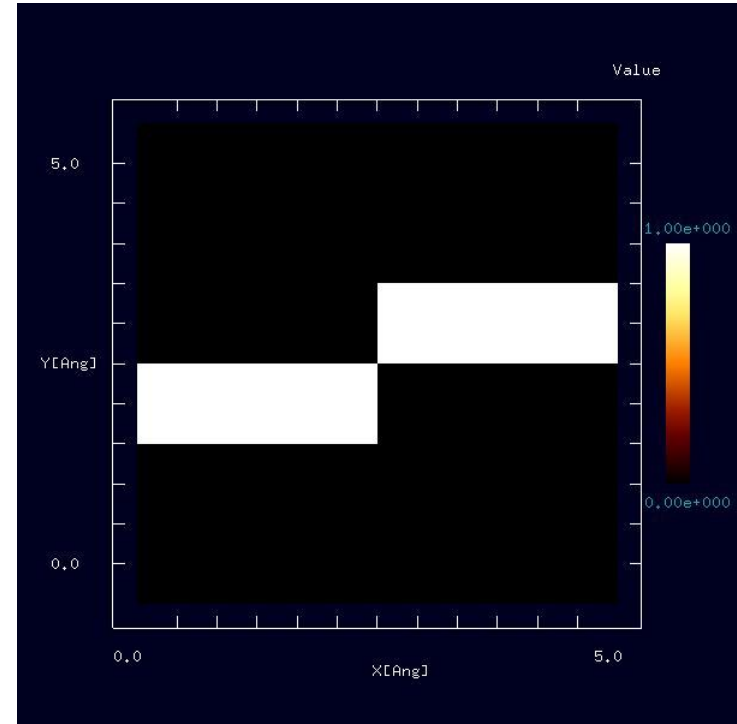
標本点を2次元平面上で等間隔に6×6として、
ずれ関数の値の分布を示したグラフ

フィッティング直線： $y = ax + b$

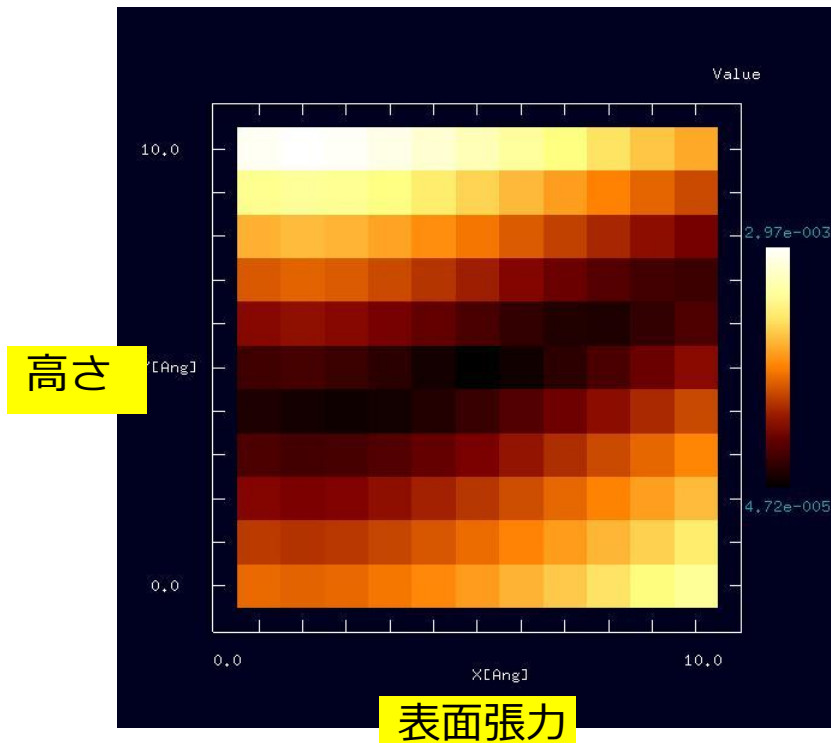
係数 $a=2.88724$, $b=0.280269$

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

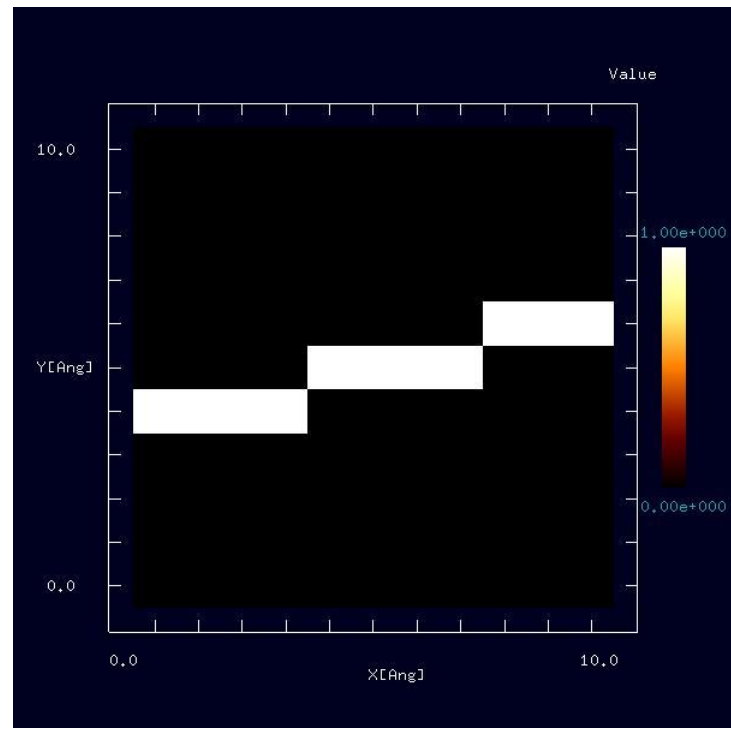
表面張力：0.2508[N/m]、
試料表面の基板からの高さ：0.100439[nm]



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： $y = ax + b$

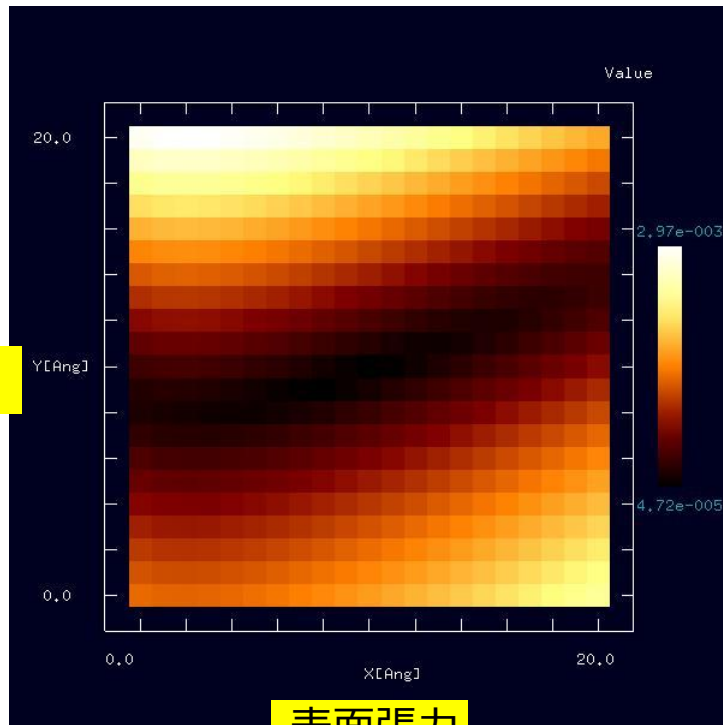
係数 $a=2.93077$, $b=0.291201$

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

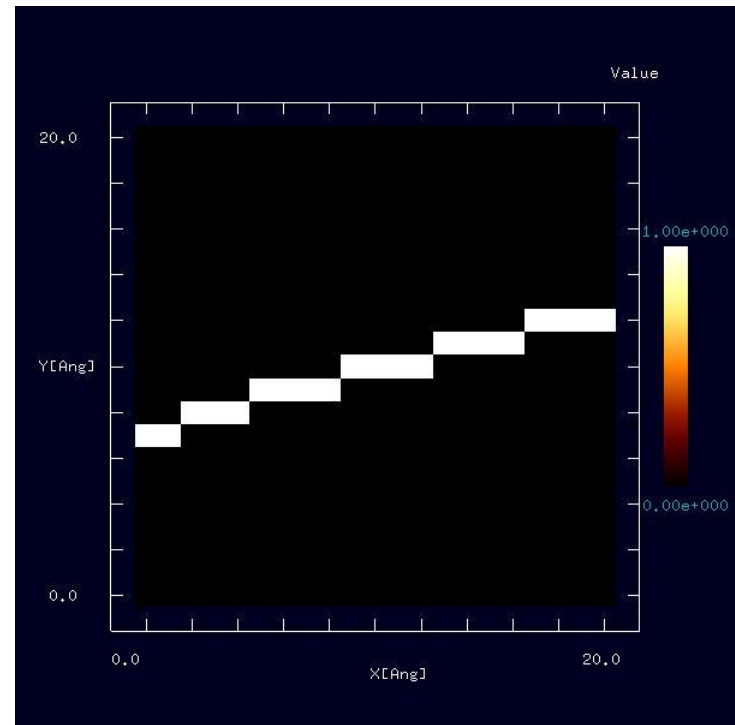
標本点を2次元平面上で等間隔に21×21として、
ずれ関数の値の分布を示したグラフ

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

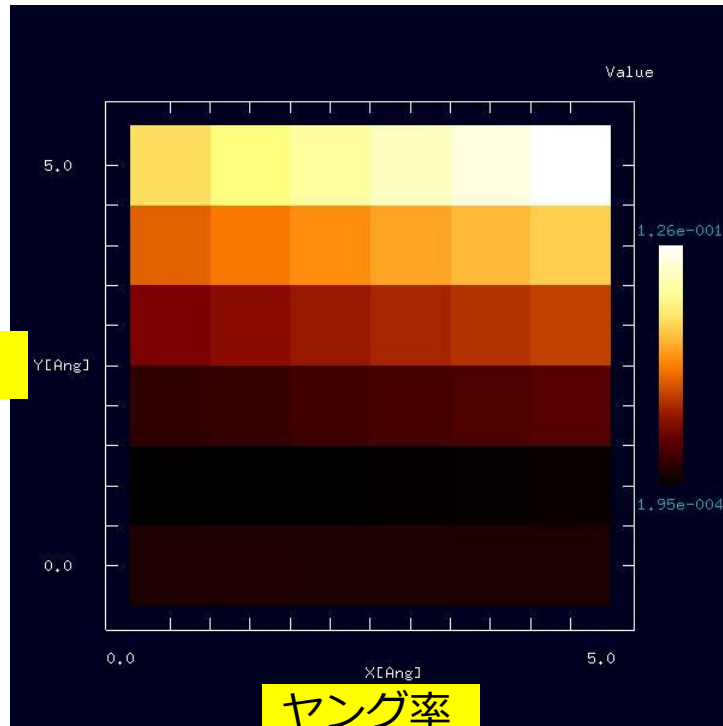
正解として、

ヤング率：80.0[GPa]

試料表面の基板からの高さ：0.5[nm]

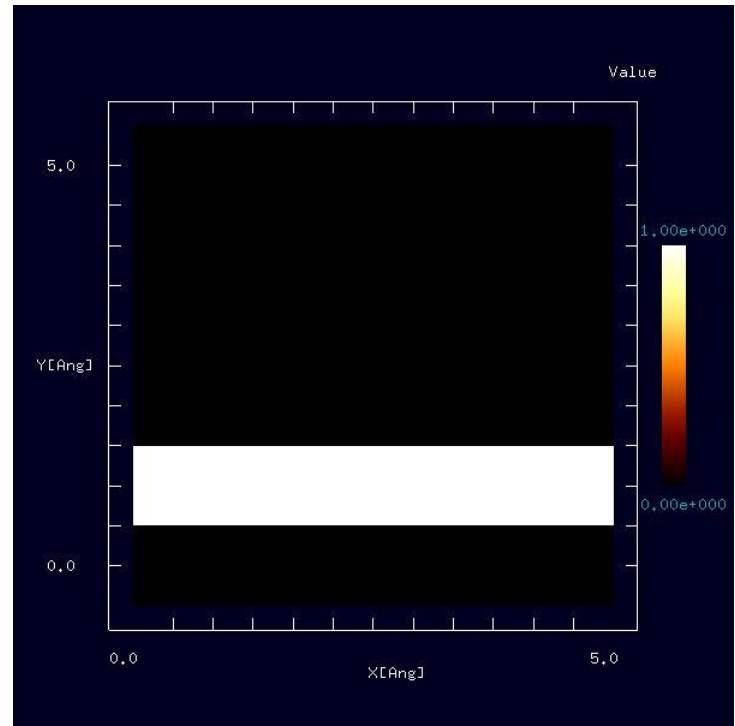
に近い値が得られたら合格

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

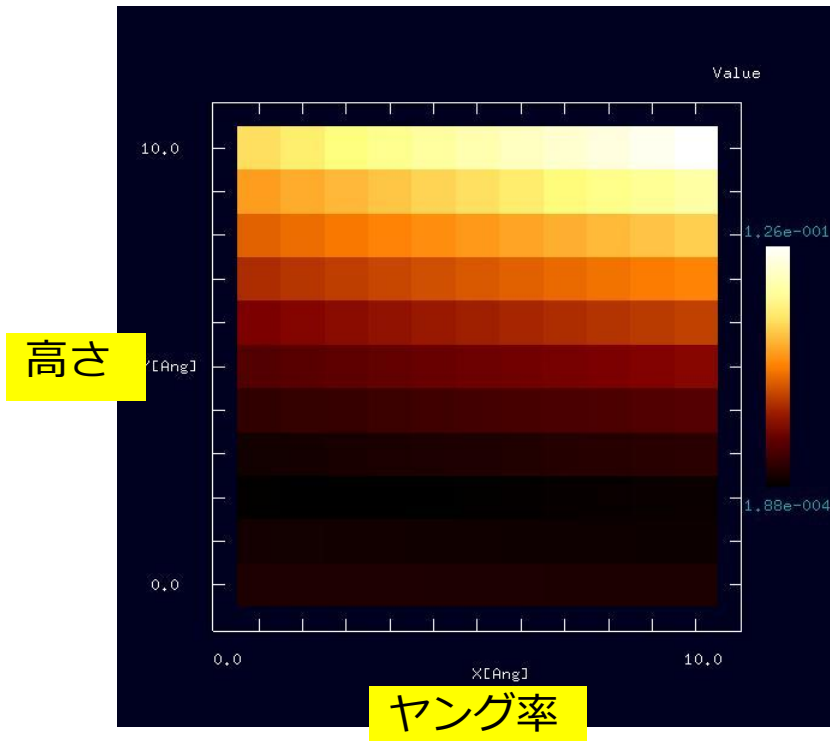
フィッティング直線： $y = ax + b$

係数 $a = -0.0122675$, $b = 6.28559$

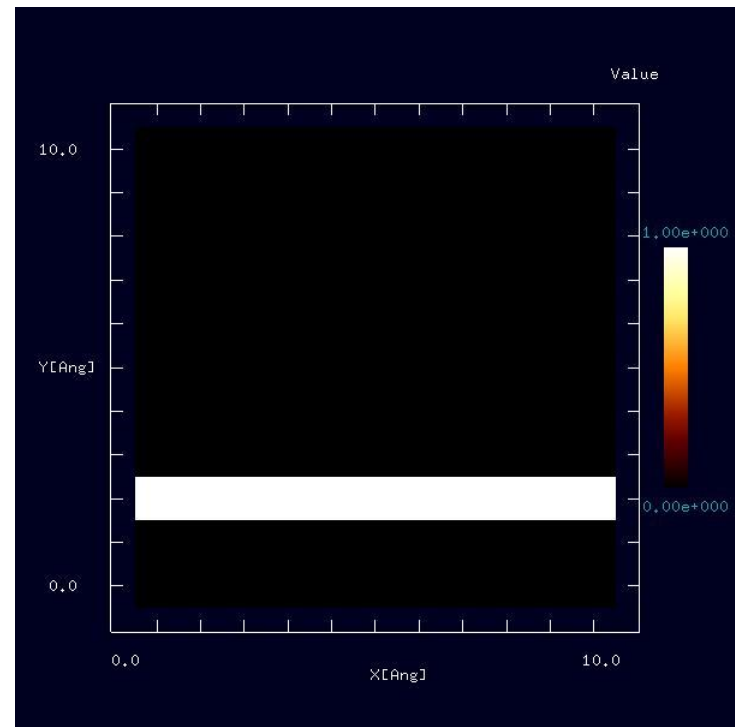
フィッティングで得られた直線を、100等分して、
ずれ関数が最小となる点を探す



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

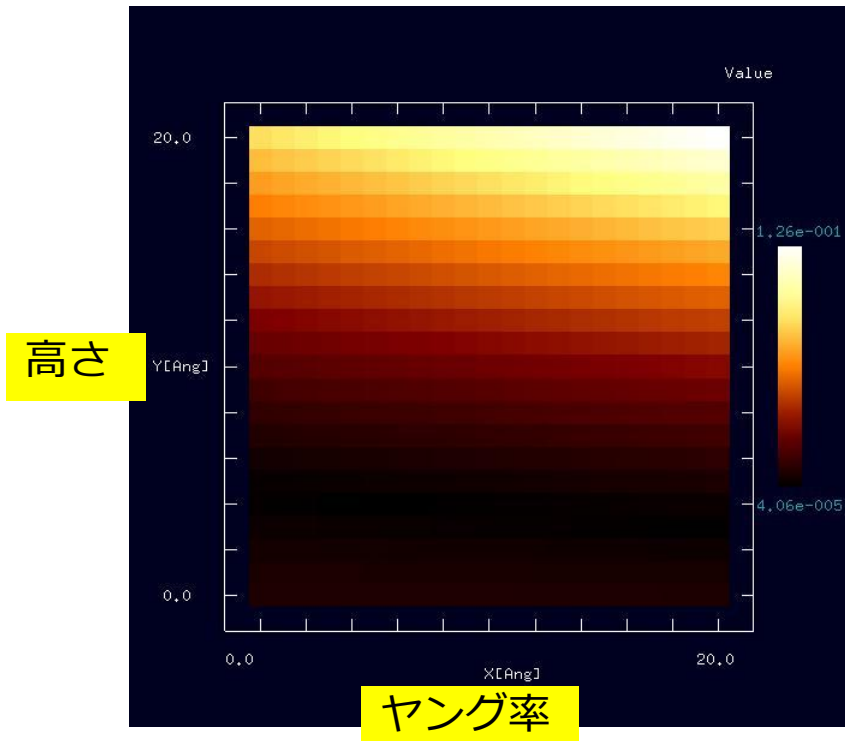
フィッティング直線： $y = ax + b$

係数 $a = -0.0288849$, $b = 7.51712$

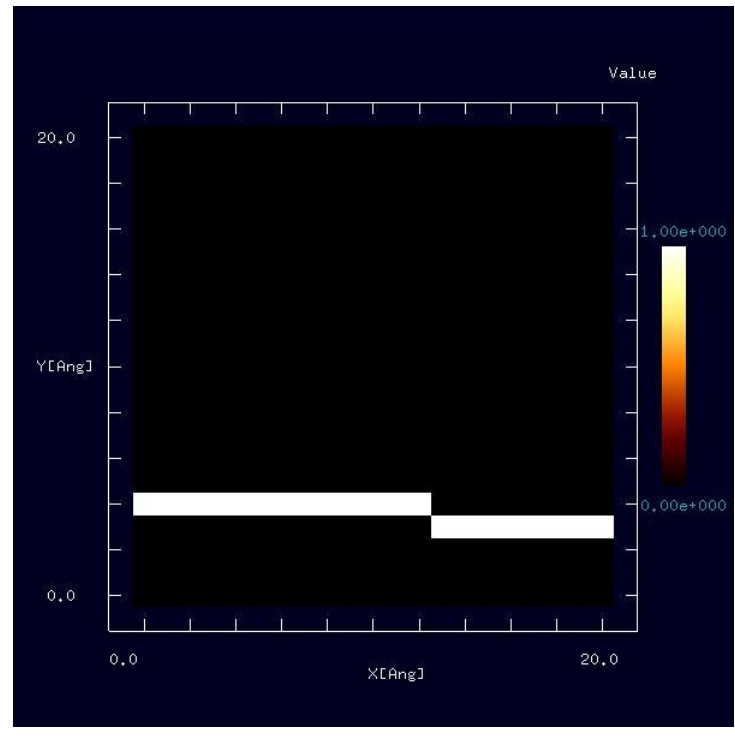
フィッティングで得られた直線を、200等分して、ずれ関数が最小となる点を探す



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

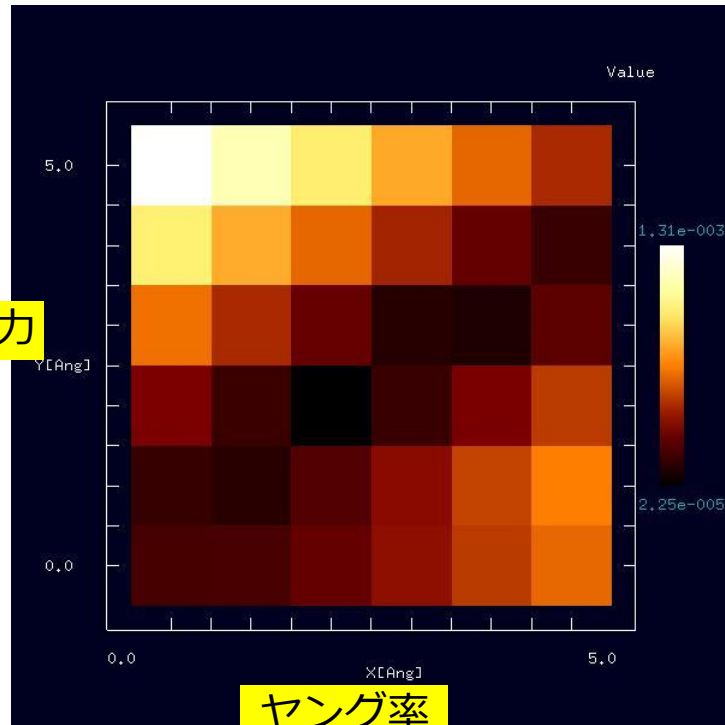
正解として、

ヤング率：80.0[GPa]

表面張力：0.25[N/m]

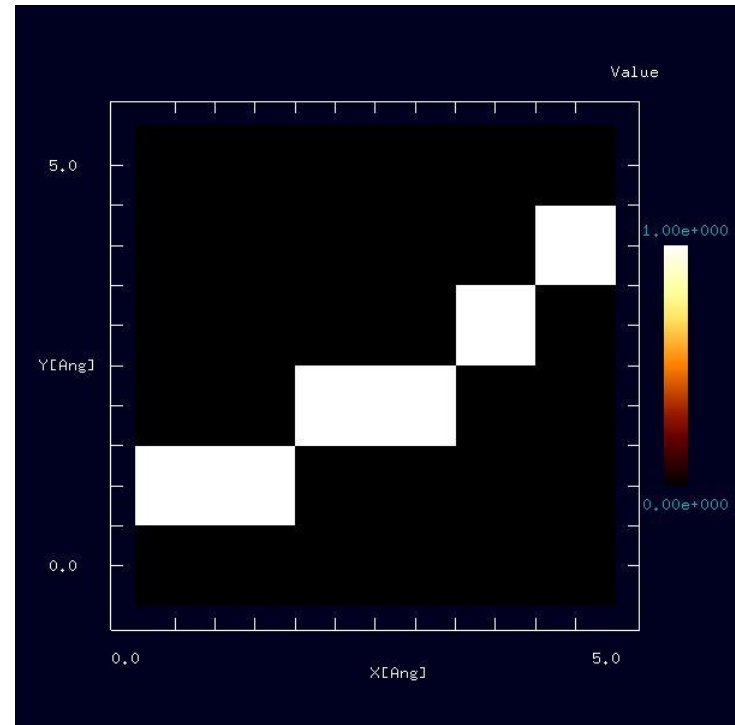
に近い値が得られたら合格

表面張力



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： $y = ax + b$

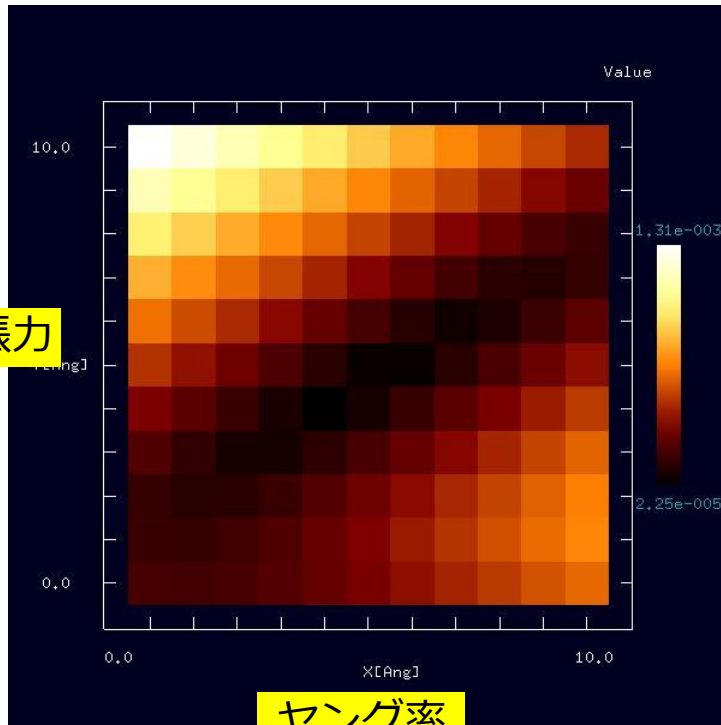
係数 $a=0.00696994$, $b=-0.312991$

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

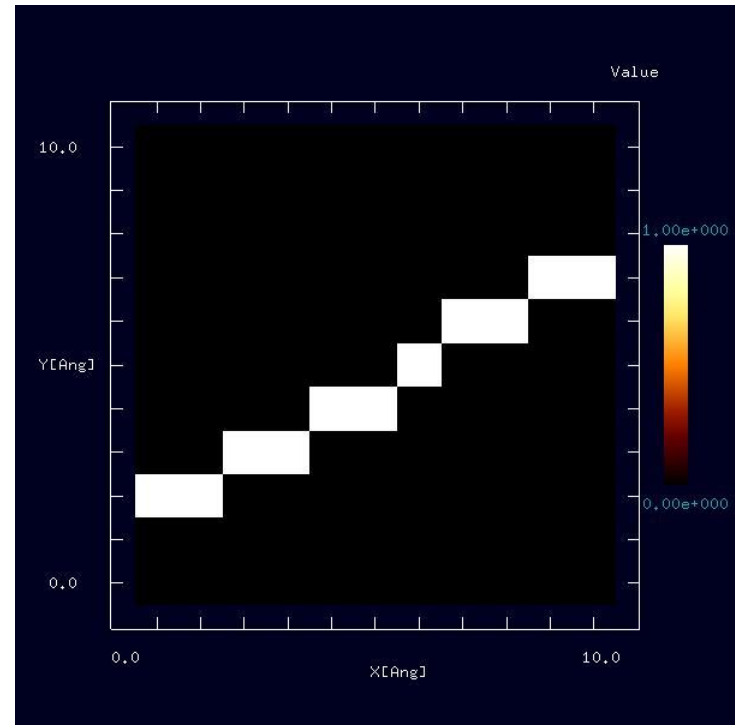
標本点を2次元平面上で等間隔に11×11として、
ずれ関数の値の分布を示したグラフ

フィッティング直線： $y = ax + b$

係数 $a=0.00713769$, $b=-0.325783$

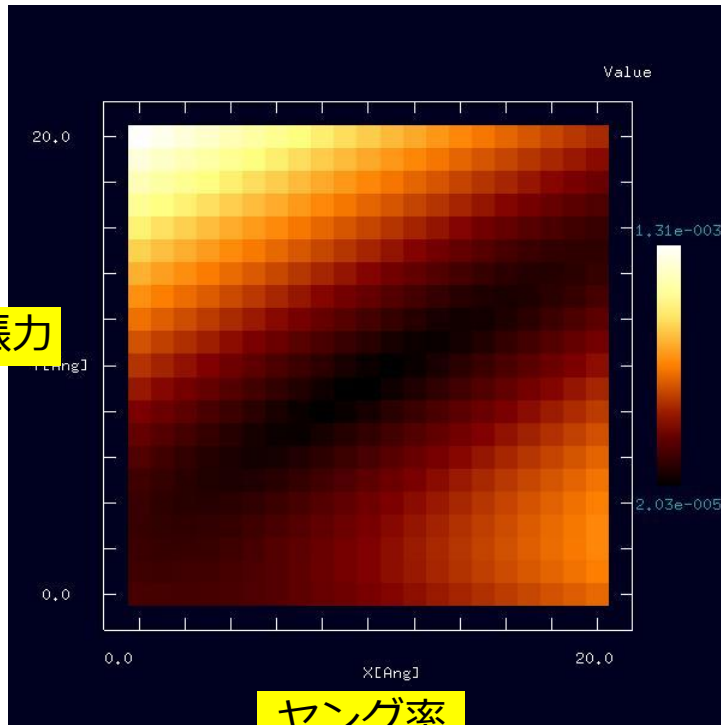
フィッティングで得られた直線を、200等分して、
ずれ関数が最小となる点を探す

→ 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

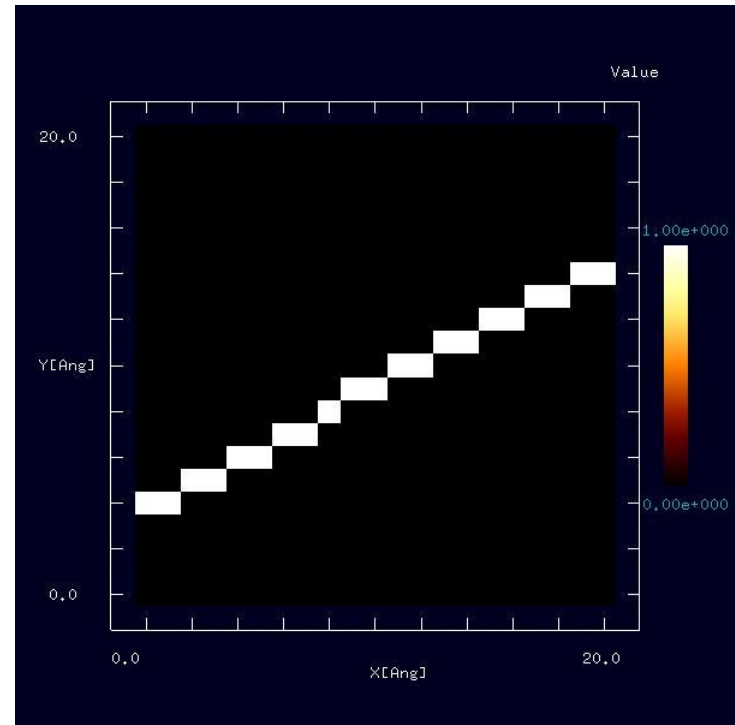
標本点を2次元平面上で等間隔に21×21として、
ずれ関数の値の分布を示したグラフ

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

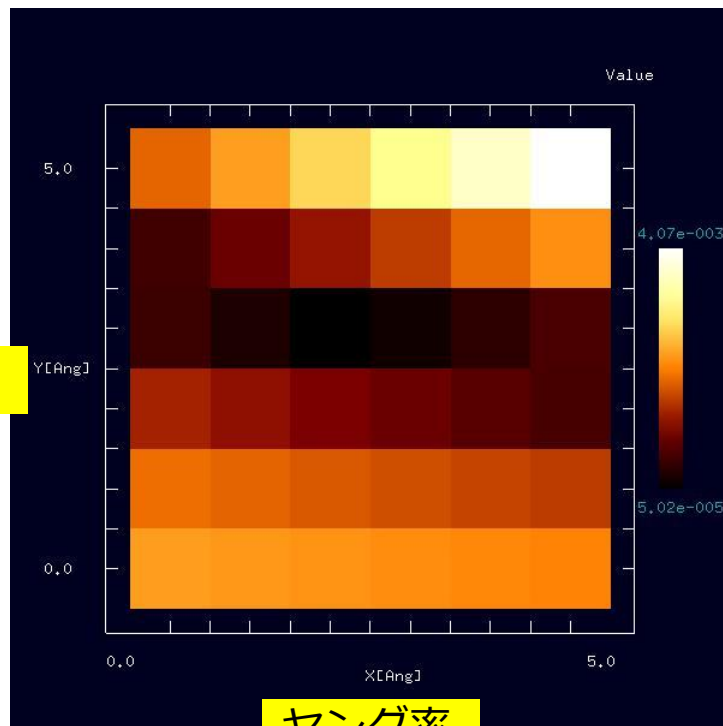
正解として、

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

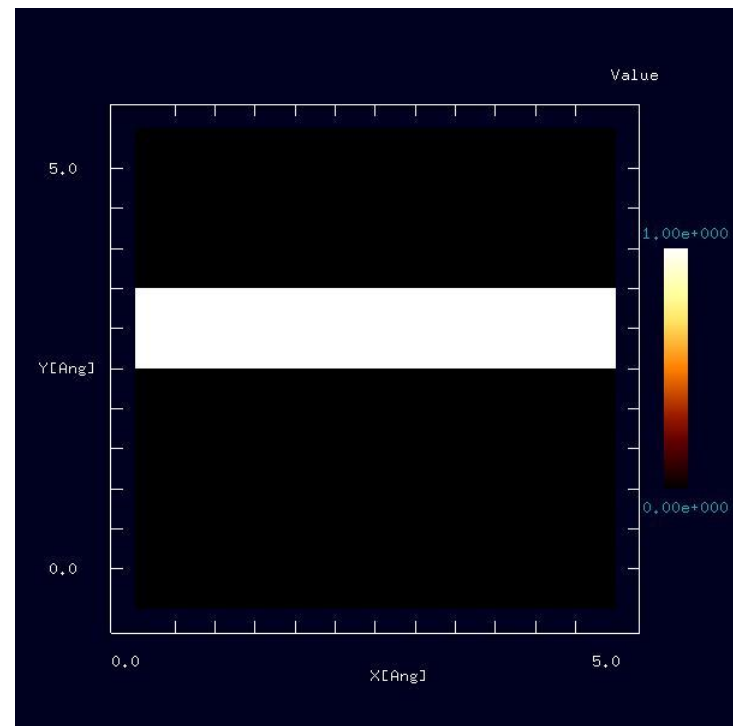
標本点を2次元平面上で等間隔に6×6として、
ずれ関数の値の分布を示したグラフ

フィッティング直線： $y = ax + b$

係数 $a=-0.0264091$, $b=3.10113$

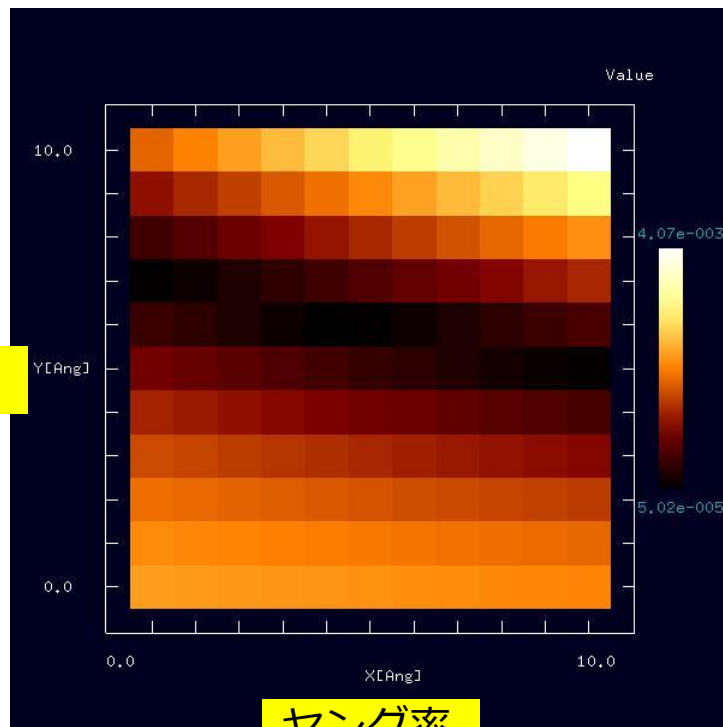
フィッティングで得られた直線を、100等分して、
ずれ関数が最小となる点を探す

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

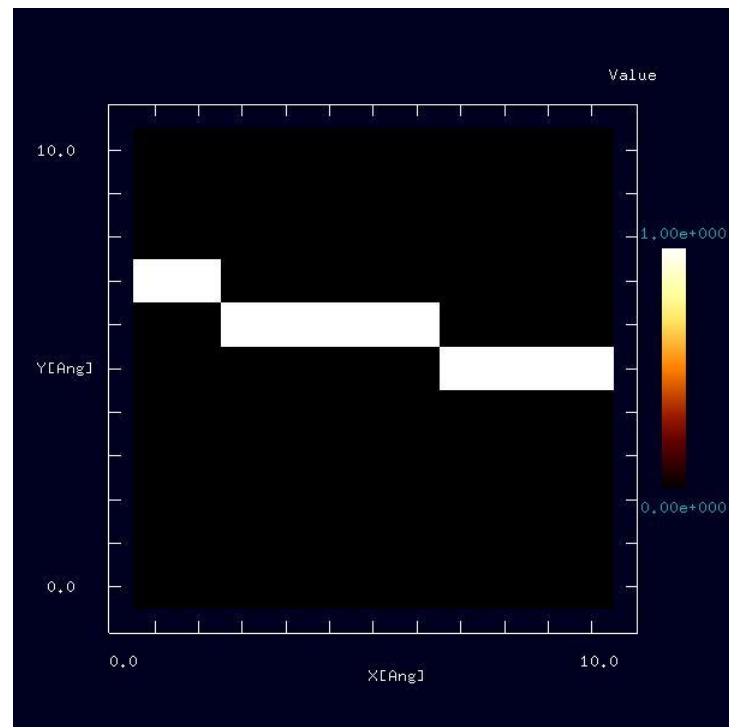
標本点を2次元平面上で等間隔に11×11として、
ずれ関数の値の分布を示したグラフ

フィッティング直線： $y = ax + b$

係数 $a = -0.0382662$, $b = 4.05075$

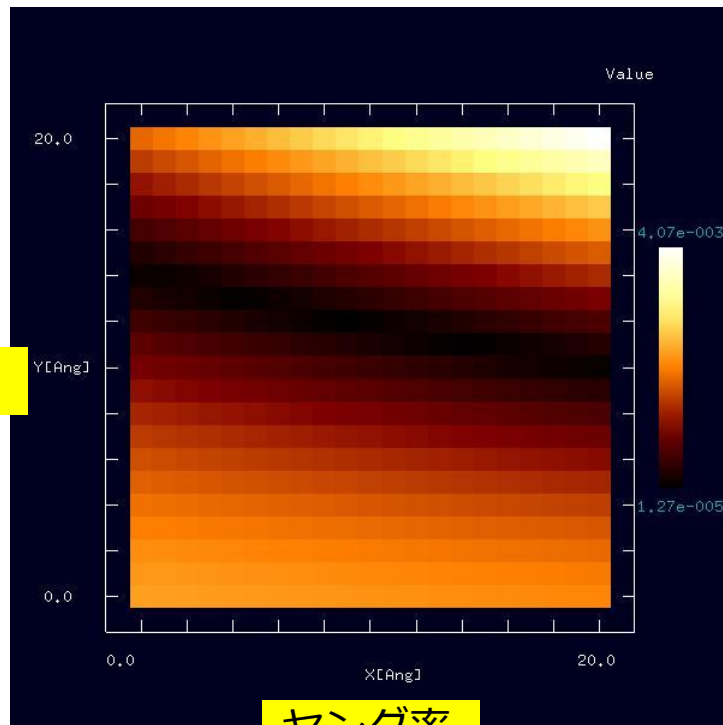
フィッティングで得られた直線を、200等分して、
ずれ関数が最小となる点を探す

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

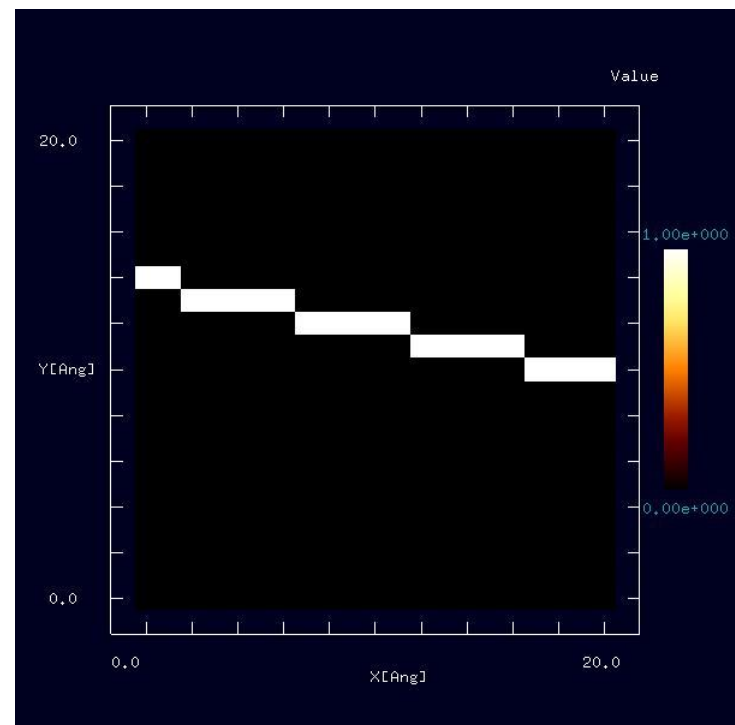
標本点を2次元平面上で等間隔に21×21として、
ずれ関数の値の分布を示したグラフ

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

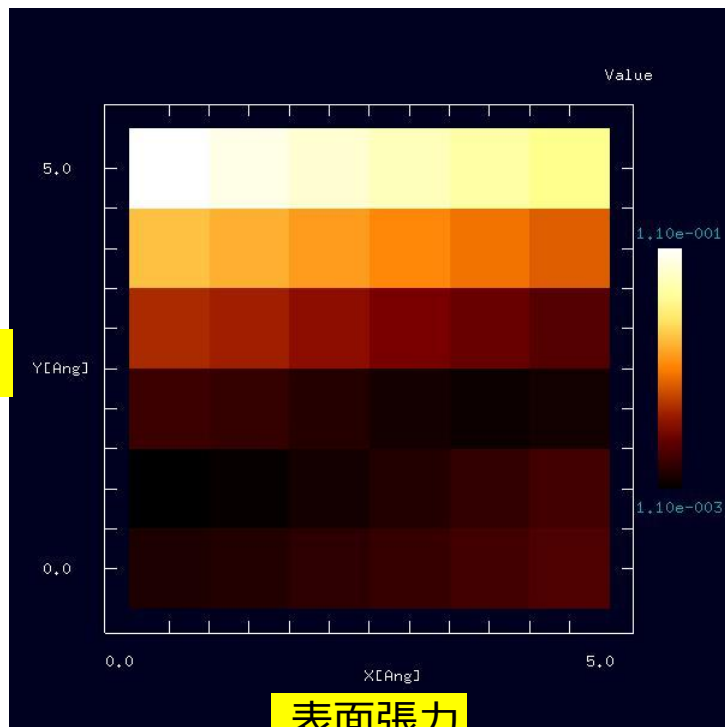
正解として、

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

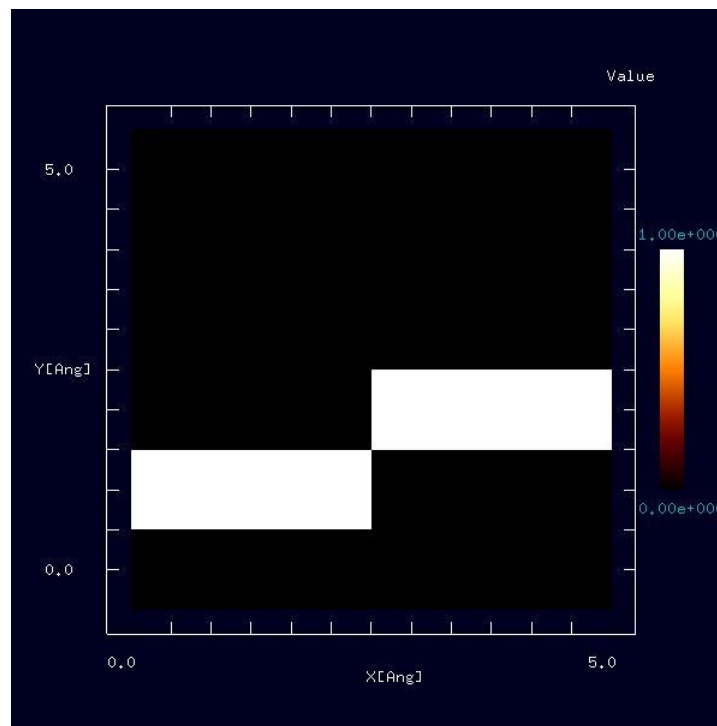
標本点を2次元平面上で等間隔に6×6として、
ずれ関数の値の分布を示したグラフ

フィッティング直線： $y = ax + b$

係数 $a=2.55876$, $b=3.27866$

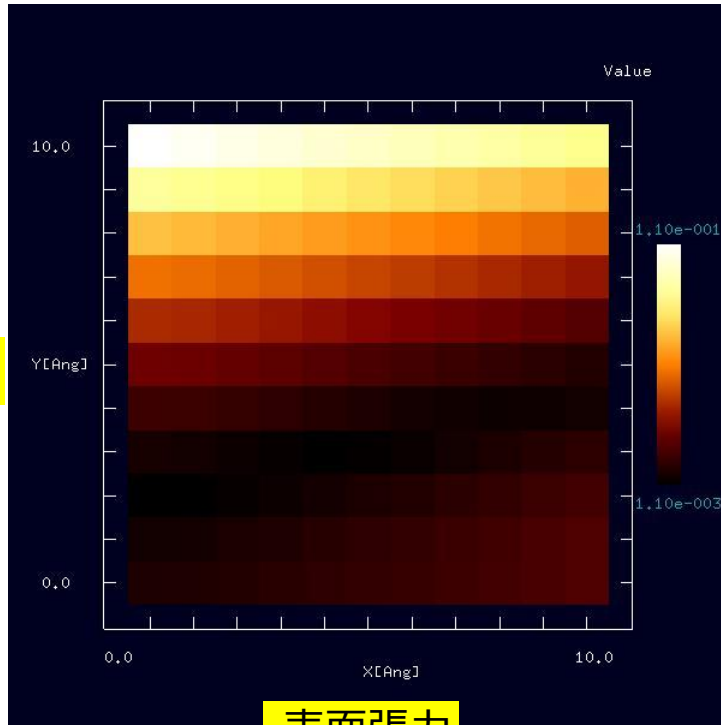
フィッティングで得られた直線を、100等分して、
ずれ関数が最小となる点を探す

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

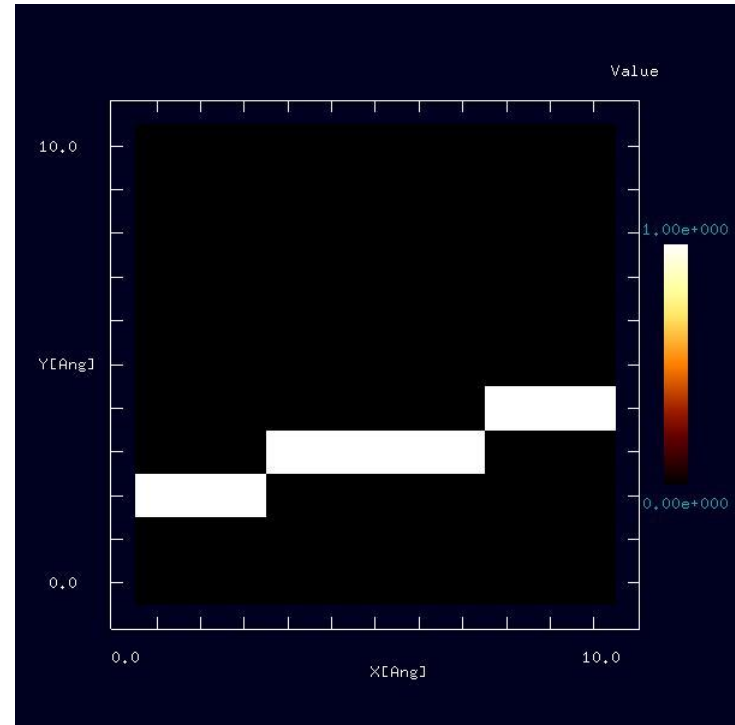
標本点を2次元平面上で等間隔に11×11として、
ずれ関数の値の分布を示したグラフ

フィッティング直線： $y = ax + b$

係数 $a=2.82603$, $b=3.2859$

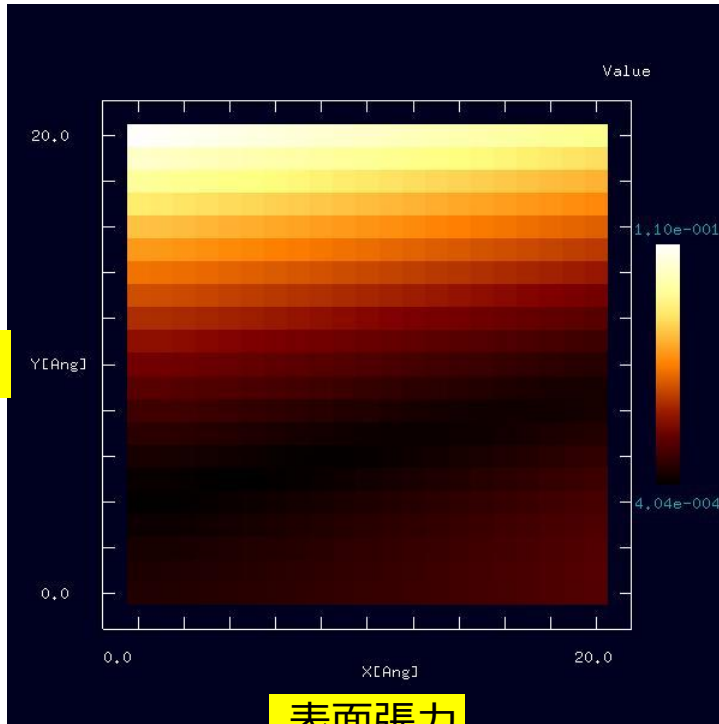
フィッティングで得られた直線を、200等分して、
ずれ関数が最小となる点を探す

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

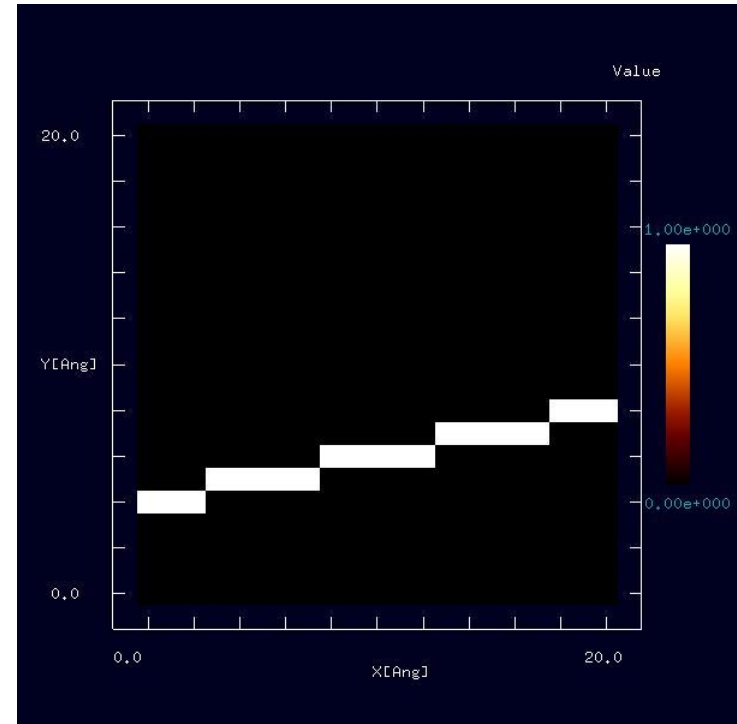
標本点を2次元平面上で等間隔に21×21として、
ずれ関数の値の分布を示したグラフ

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

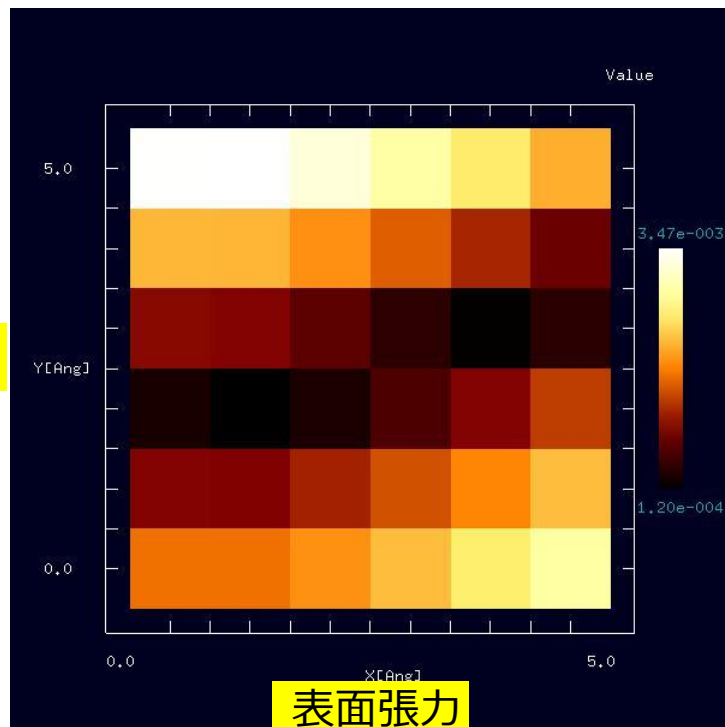
粘性抵抗：12.0[N/m]
ポアソン比：0.3
ヤング率：80.0[GPa]
表面張力：0.25[N/m]
試料表面の基板からの高さ：0.1[nm]
周波数シフトの観測値：-221.8349[Hz]
位相シフトの観測値：0.0004840706[radian]

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[m²/s]
密度：200[kg/m³]

高さ



表面張力

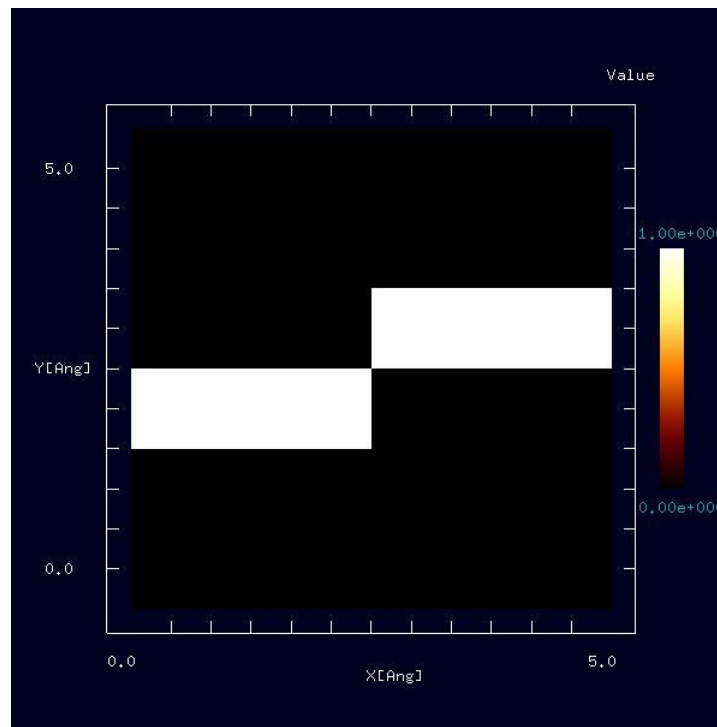
標本点を2次元平面上で等間隔に6×6として、
ずれ関数の値の分布を示したグラフ

フィッティング直線： $y = ax + b$

係数 $a=3.26185$, $b=0.203349$

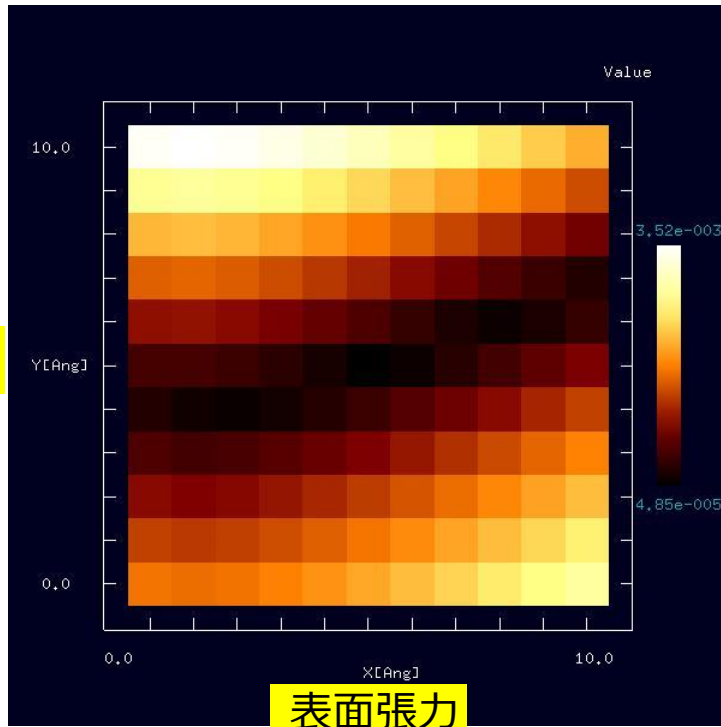
フィッティングで得られた直線を、100等分して、
ずれ関数が最小となる点を探す

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



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

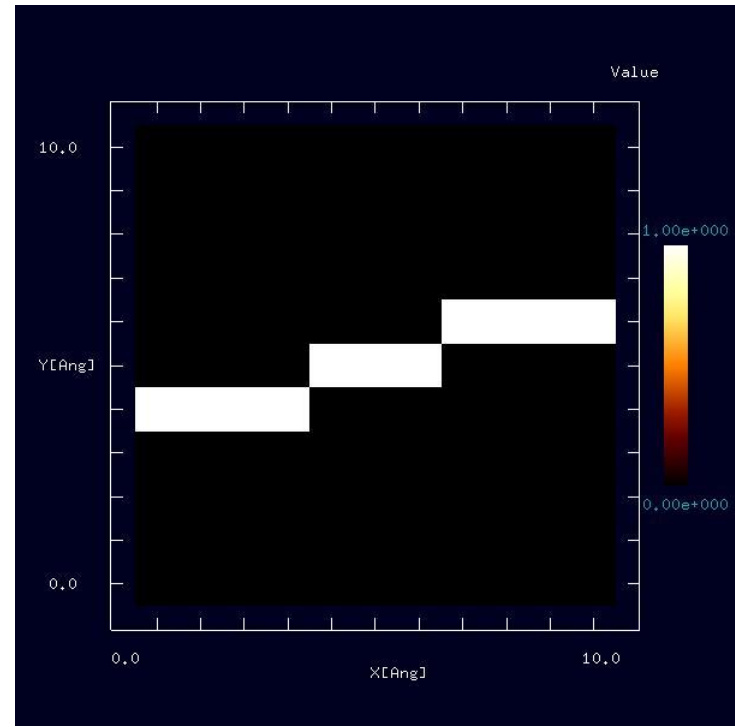
標本点を2次元平面上で等間隔に 11×11 として、
ずれ関数の値の分布を示したグラフ

フィッティング直線： $y = ax + b$

係数 $a=3.12172$, $b=0.245788$

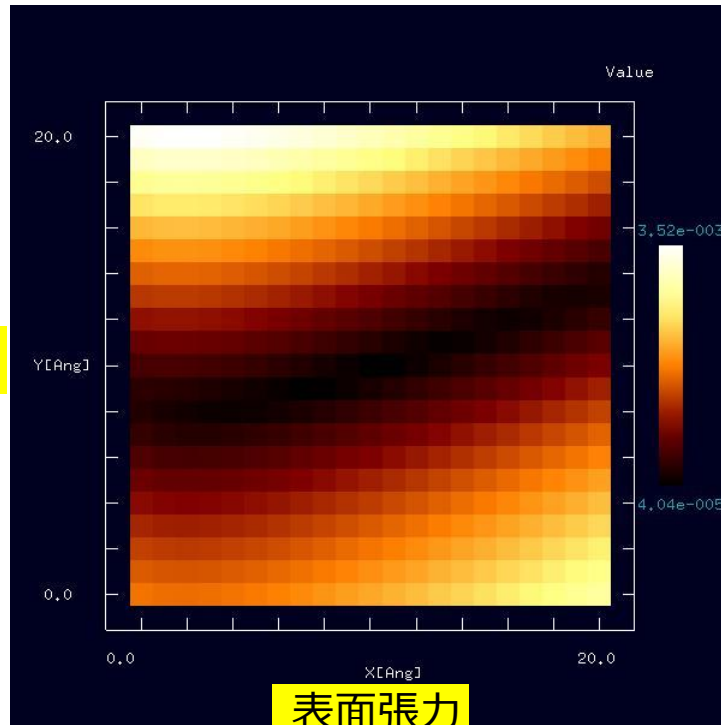
フィッティングで得られた直線を、200等分して、
ずれ関数が最小となる点を探す

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、
 11×11 の区画で表した図

高さ



表面張力

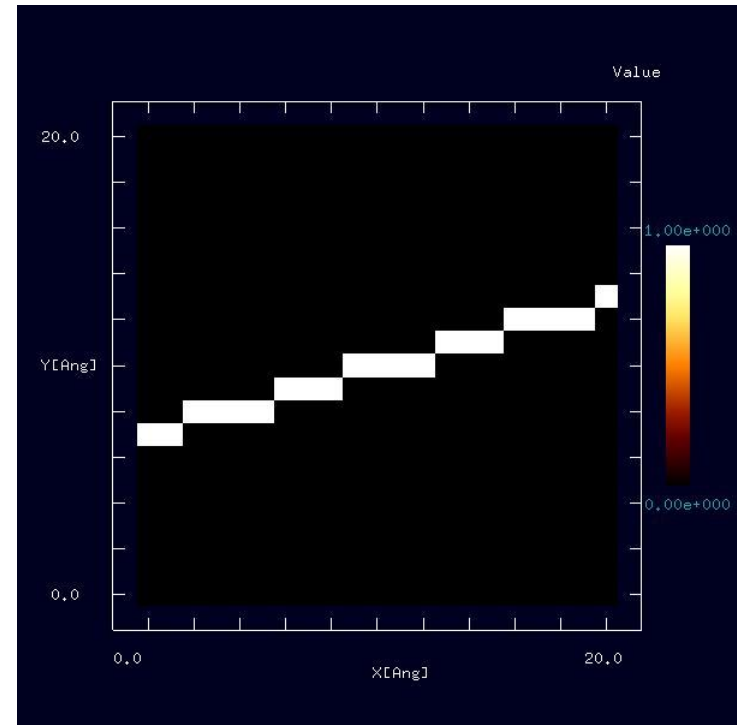
標本点を2次元平面上で等間隔に 21×21 として、
ずれ関数の値の分布を示したグラフ

フィッティング直線： $y = ax + b$

係数 $a=3.12627$, $b=0.23324$

フィッティングで得られた直線を、400等分して、
ずれ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、
 21×21 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]

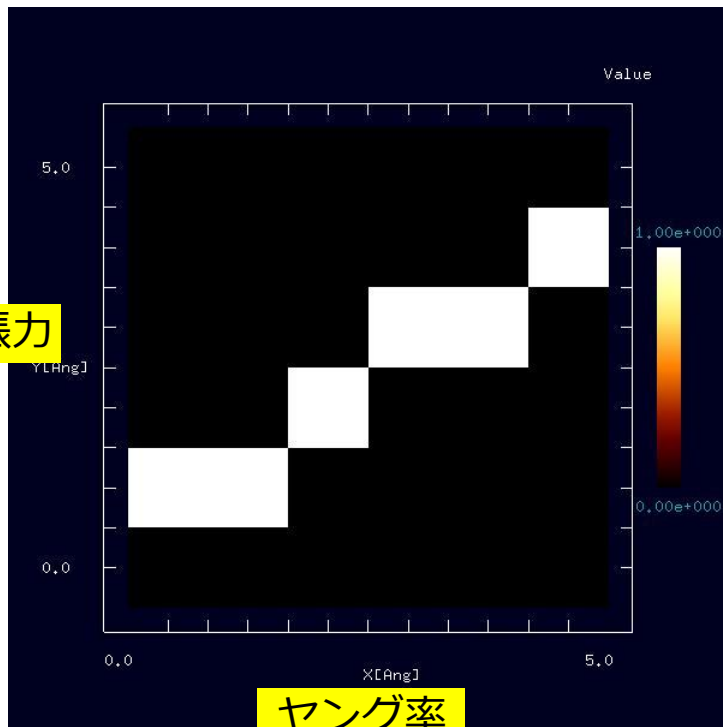
に近い値が得られたら合格

液中環境パラメータ

動粘性率：0.25E-6[m²/s]

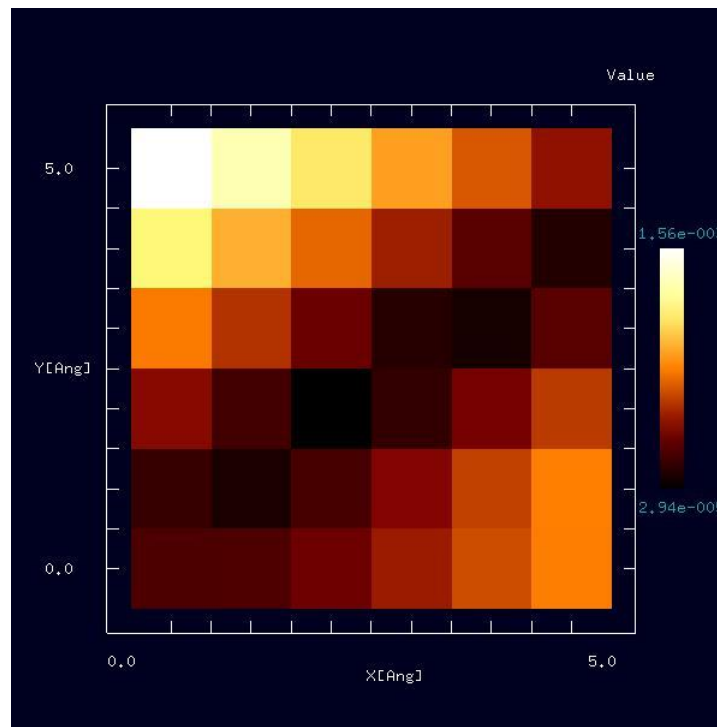
密度：200[kg/m³]

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

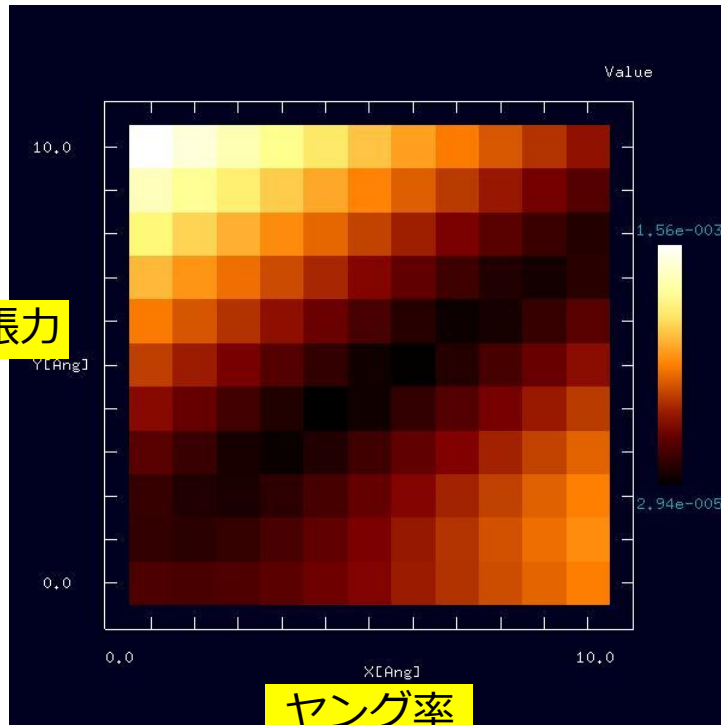
フィッティング直線： $y = ax + b$

係数 $a=0.00787027$, $b=-0.380466$

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

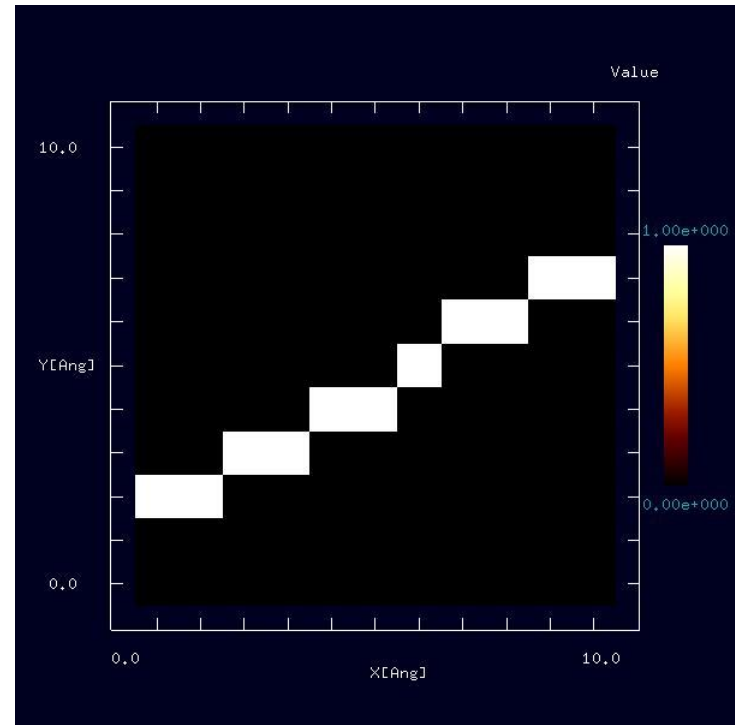
標本点を2次元平面上で等間隔に11×11として、
ずれ関数の値の分布を示したグラフ

フィッティング直線： $y = ax + b$

係数 $a=0.0080779$, $b=-0.398524$

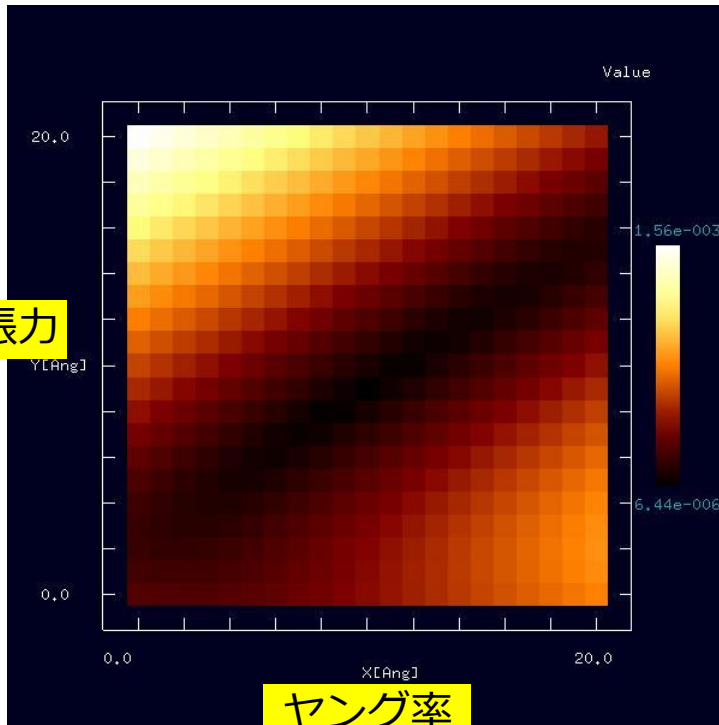
フィッティングで得られた直線を、200等分して、
ずれ関数が最小となる点を探す

→ 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

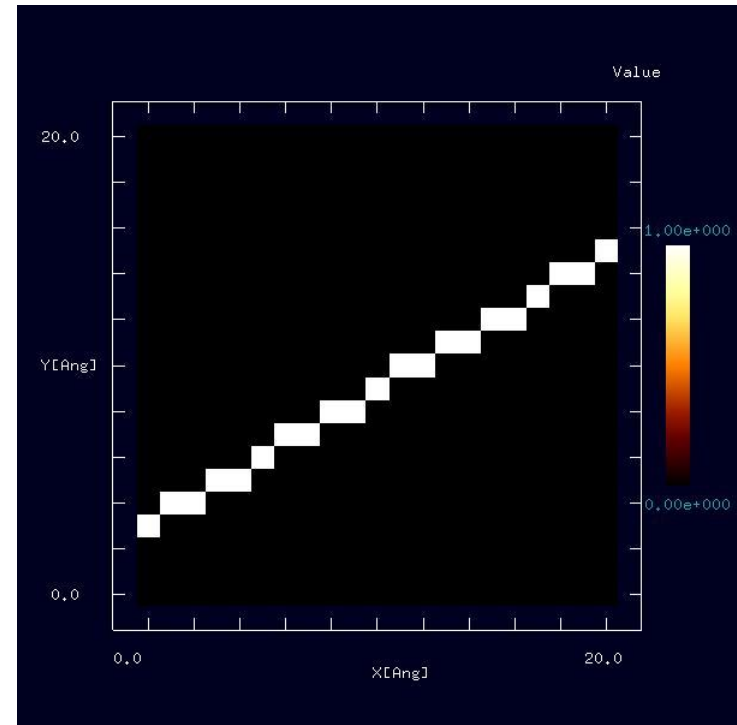
標本点を2次元平面上で等間隔に21×21として、
ずれ関数の値の分布を示したグラフ

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]

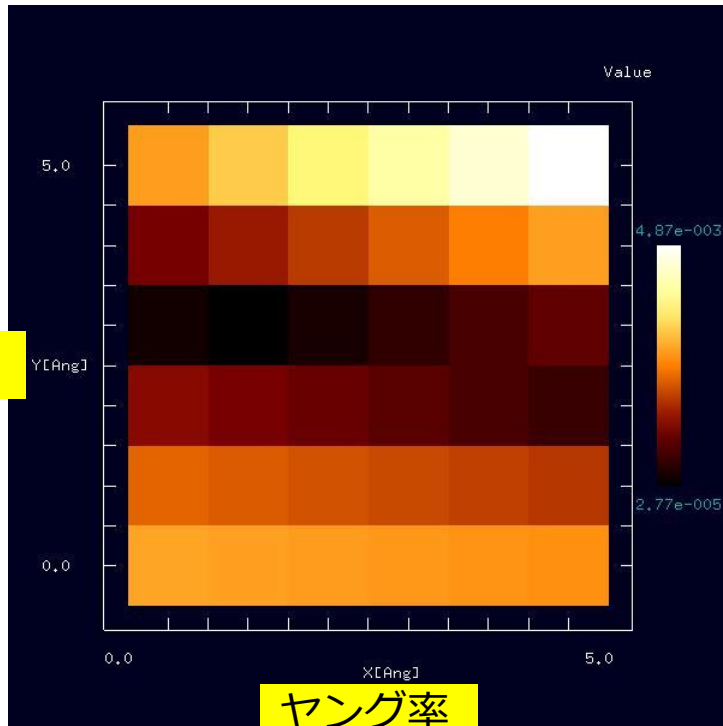
に近い値が得られたら合格

液中環境パラメータ

動粘性率：0.25E-6[m²/s]

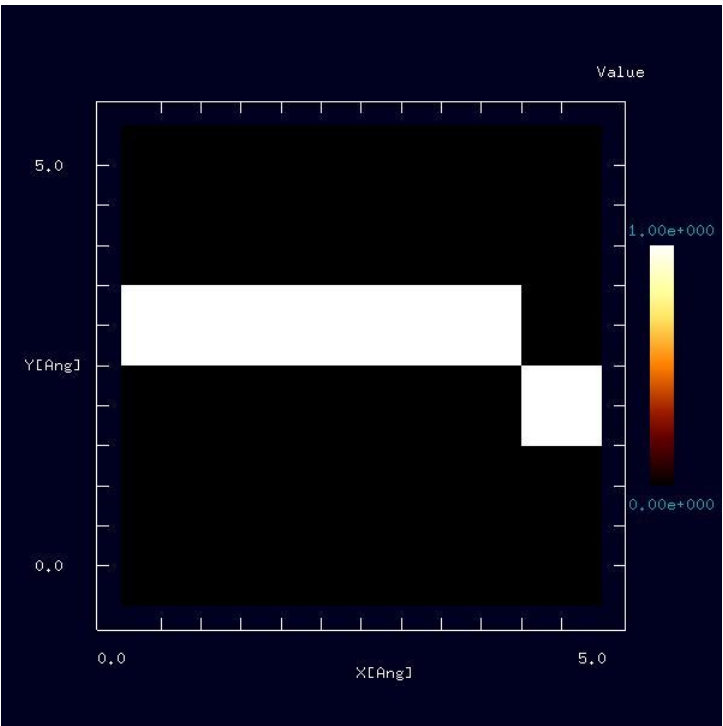
密度：200[kg/m³]

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： $y = ax + b$

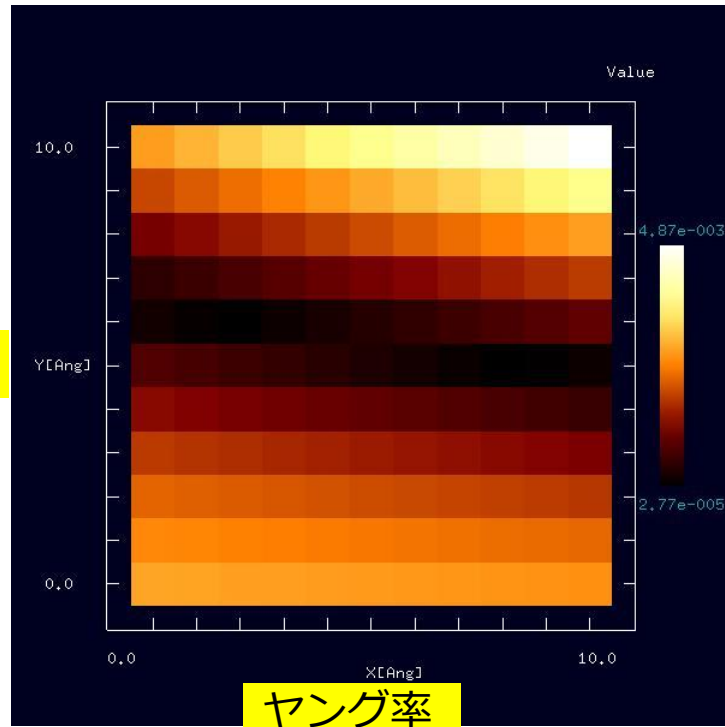
係数 $a = -0.0324468$, $b = 3.62404$

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

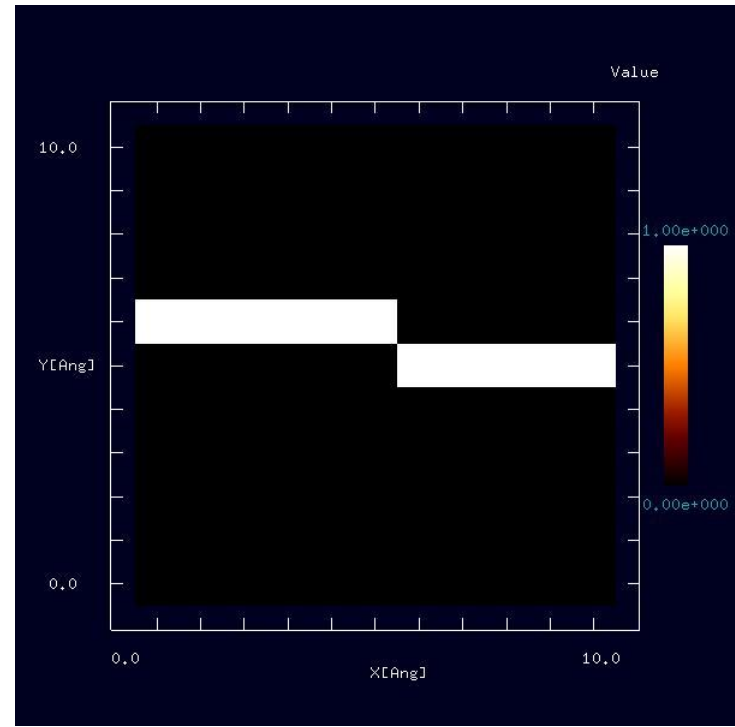
標本点を2次元平面上で等間隔に11×11として、
ずれ関数の値の分布を示したグラフ

フィッティング直線： $y = ax + b$

係数 $a = -0.0320542$, $b = 3.58204$

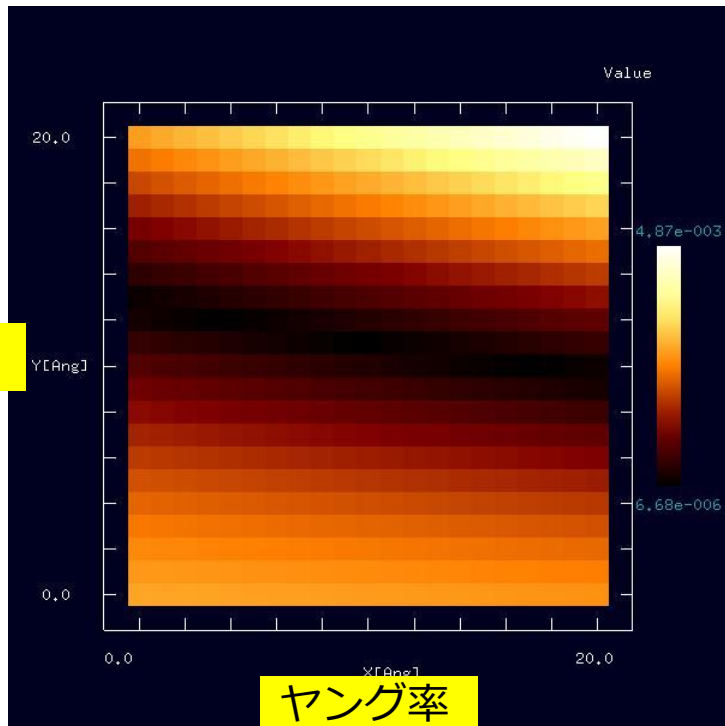
フィッティングで得られた直線を、200等分して、
ずれ関数が最小となる点を探す

→ 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

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

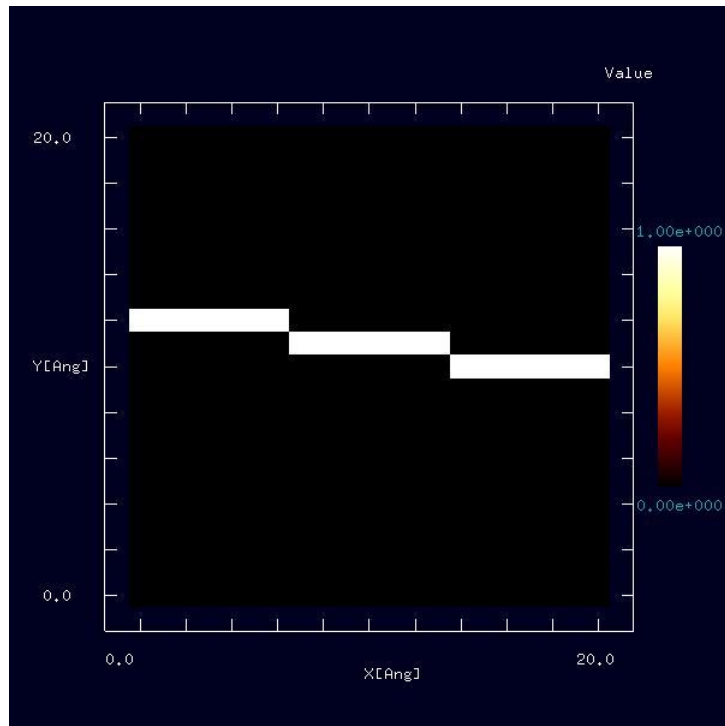
フィッティング直線： $y = ax + b$

係数 $a = -0.0306644$, $b = 3.46385$

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]



最小二乗法で得られた直線を、
21×21の区画で表した図