モンテカルロ法による NC-AFM のフォースカーブの解析

NC-AFM force curve analysis by Monte carlo method

阪大院基礎工 [1]、長岡技大院工 [2]、○Diao Zhuo[1]、勝部 大樹 [2]、山下 隼人 [1]、阿部 真之 [1]
Osaka Universiy[1]. Nagaoka Universiy of Technology[2]., ○Zhuo Diao[1], Daiki Katsube[2], Hayato Yamashita[1], Masayuki Abe[1]
E-mail: abe@stec.es.osaka-u.ac.jp

非接触原子間力顕微鏡 (NC-AFM) が測定する力 F は原子分解能の情報を有する短距離力 F_{SR} と探針のボディにかかる長距離力 F_{LR} に分けることができる．F_{SR} だけを抽出するために，F_{LR} のみ支配的になる領域 ($z > z_0$) を決め，F_{LR} をモデル化してフィッティングし，$F_{\mathrm{SR}} = F - F_{\mathrm{LR}}$ で求めることができる．これまでに，我々は z_0 を自動的に求める手法 [1] を確立した．

AFM の探針にかかる力は vdW 力のほか，静電気力なども存在するので，F_{LR} をモデル化する際に複雑な力の物理系を考えないといけないが，便利上，図 1(a) のような漸近線モデル F_{fit} として考える場合がある．図 1(a) のように，$z > z_0$ の領域で $F_{fit}(z > z_0, a, b, c, d)$ における a, b, c, d パラメータを最小二乗法でフィッティング行う際に，d の値を異なる 3 つの値で固定したとき，フィッティングを行った領域 ($z > z_0$) では F_{fit} はお互い重なるが，予測領域 ($z < z_0$) ではばらつきが生じる．これは、最小二乗法では F_{fit} のパラメータを正確に決めることができず，$F_{\mathrm{SR}} = F - F_{\mathrm{fit}}$ で F_{SR} を求める際に不確定性が生じたためである．

そこで，我々はモンテカルロ的なフィッティング手法を適用した．本手法は $F_{fit}(a, b, c, d)$ を階層ベイズモデルに変換し，No-U-Turn Sampler[2] のアルゴリズムに基づいて，ランダムなフィッティングの条件を適用しながら 8000 回フィッティングによるサンプリングを行った．その結果，8000 セットの a, b, c, d パラメータ結果サンプルを得られて，その統計的分布を図 1(b) にプロットした．図 1(b) の分布の形を見ると，a, b, c, d はある取り得る幅を持つ正規分布として求められる．本発表ではさらに，この手法による解析の妥当性検証手法と我々が提案した F_{fit} モデルの a, b, c, d の意味について議論する．

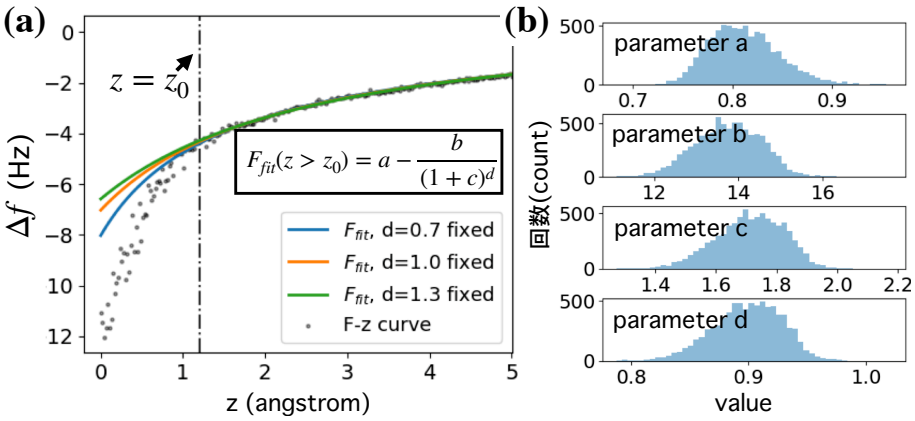

図 1.(a) Si(111)-(7×7) の Faulted Center atom におけるフォースカーブに z_0 を決めて，最小二乗法を用いて F_{fit} モデルでフィッティングを行った．d の値を 0.7, 1.0, 1.3 に固定したにもかかわらず，F_{fit} モデルをフィットする結果を得られたので，この方法では正確な a, b, c, d の値を定めることができない．(b) 本手法によるモンテカルロ的な解析から，8000 回のランダムな条件におけるフィッティング結果をヒストグラムで示した．

[1] Z. Diao et. al., arXiv:2004.04882(2020) [2] M. D. Hoffman et. al., JMLR, **15**, 47(2014)