

Оптимизация измерений вектора силы взаимодействия в атомно-силовой микроскопии

© А.В. Анкудинов,¹ А.М. Минарский²

¹ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
194021 Санкт-Петербург, Россия

² Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет им. Ж.И. Алфёрова РАН,
194021 Санкт-Петербург, Россия
e-mail: Alexander.Ankudinov@mail.ioffe.ru

Поступило в Редакцию 30 октября 2020 г.

В окончательной редакции 27 января 2021 г.

Принято к публикации 28 января 2021 г.

Рассмотрена задача оптимизации измерений трех пространственных компонент силы взаимодействия зонд–образец и соответствующего вектора смещения „идеального кантилевера“. В атомно-силовом микроскопе со схемой оптического рычага для определения этих компонент необходимо регистрировать углы изгиба не меньше чем в двух точках на прямоугольной консоли кантилевера и угол кручения в какой-то из них. Доказано аналитически, что одной оптимальной точкой является пересечение оси зонда с плоскостью консоли. Разработана методика расчета оптимального положения другой точки. Проведен эксперимент по картированию силы и вектора смещения, получено удовлетворительное согласие с теорией.

Ключевые слова: атомно-силовая микроскопия, прямые измерения пространственных компонент силы, кантилевер, оптический рычаг.

DOI: 10.21883/JTF.2021.06.50877.303-20

Введение

В атомно-силовой микроскопии (АСМ) [1,2] поверхность образца исследуется твердотельным зондом с радиусом закругления кончика несколько нанометров. Зонд расположен на свободном конце упругой консоли субмиллиметровых размеров (вся конструкция называется кантилевером), деформации которой измеряются для контроля силы взаимодействия зонд–образец [2]. В таких востребованных применениях АСМ, как метрология боковых стенок структур [3], манипуляция микро- и наночастицами [4,5], силовая микроскопия пьезоотклика [6], важно знать величину и направление перемещения кончика зонда и силы взаимодействия зонд–образец. Для этого нужно детектировать три независимых параметра, характеризующих деформацию консоли [2,7,8]. Это позволяет пока редкая схема регистрации деформаций консоли оптического рычага (ОР) + интерферометра (И) [7,9,10], комбинирующая методы ОР [11] и И [12]. В выбранной на консоли точке первым методом детектируют углы изгиба и кручения, а вторым — величину изгиба. Также все пространственные компоненты силы взаимодействия и вектора смещения можно определить только методом ОР [8,13], если кроме углов изгиба и кручения в одной точке на консоли измерить угол изгиба в какой-то другой точке.

Разработчики схемы ОР + И [9,10] фокусировали и лазер ОР, и лазер И на свободном конце консоли. Оптимальность такого положения фокуса при определении вектора силы взаимодействия зонд–образец не рас-

считывалась. В экспериментальном исследовании [8], использовавшем только метод ОР, докладывалось, что свободный конец и примерно середина консоли являются оптимальными положениями фокуса. Авторы [13], учтя в расчетах только разброс значений угла изгиба консоли, оценили графически, что минимальная ошибка в измерениях компонент силы достигается при выборе фокуса в нормированных на длину консоли положениях: около 0.46 и 1.00.

В АСМ метод ОР позволяет измерять угол отклонения консоли в заданной точке с точностью 10^{-7} – 10^{-6} rad [2]. Для консоли типичной длины $200\ \mu\text{m}$ ошибка измерений величины изгиба в той же точке будет менее одного ангстрема. Положение фокуса лазера схемы ОР обычно измеряется с точностью единицы, десятки микрометров [14,15]. Неопределенность положения фокуса, оказываясь на 5–6 порядков больше разброса величины изгиба консоли, может доминировать в ошибке измерений компонент силы. Это снижает значимость результата работы [13], рассмотревшей случай, когда эту ошибку определяет только разброс значений угла изгиба.

В настоящей работе для атомно-силового микроскопа со схемой ОР был аналитически рассмотрен общий случай оптимизации измерений компонент силы и тензорно связанного [15,16] с ней вектора смещения „идеального кантилевера“ (зонд такого кантилевера не деформируется [15]). Доказано, что минимум ошибки измерений достигается в двух особенных точках фокуса лазера. Положение первой зависит от следующих величин: отношение ошибок измерений угла изгиба (про-

изводной угла изгиба по вертикальному направлению) прямоугольной консоли и координаты фокуса лазера ОР, пространственные компоненты силы или вектора смещения в плоскости изгиба (производные этих компонент по вертикальному направлению), высота зонда, длина консоли и ее изгибная жесткость. Вторая точка находится на свободном конце прямоугольной консоли, где крепится зонд. Используя полученные аналитические результаты, проведено экспериментальное картирование вектора смещения острия АСМ-зонда и действующей на него силы.

1. Оптимальные положения фокуса лазера ОР на консоли для картирования силы взаимодействия зонд—образец и вектора смещения „идеального кантилевера“

Пусть сила F приложена к кончику зонда АСМ-кантилевера (рис. 1). Две пространственные компоненты F_Y и F_Z вызывают изгиб консоли кантилевера на угол α , а не указанная, перпендикулярная им третья компонента F_X закручивает ее на угол β .

Если нормированная координата фокуса лазера на консоли $x = Y/l_C$, высота зонда l_T , длина консоли l_C , а ее изгибная жесткость k_C , то $\beta(x) = -(2l_T F_X / k_C l_C^2) x$ [15,16]. Введем разброс в измерениях x и β , дисперсии σ_x^2 и σ_β^2 . Дисперсия $\sigma_{F_X}^2$ убывает на отрезке $x \in [0; 1]$ и минимальна в $x = 1$, где $\sigma_{F_X} = k_C l_C^2 / (2l_T) \sqrt{\beta^2(1)\sigma_x^2 + \sigma_\beta^2}$. С другой стороны, с β можно связать компоненту X^C вектора смещения r^C „идеального кантилевера“ [15]: $\beta(x) = -[2l_T X^C / ((2\lambda^2 + \delta^2)l_C^2)]x$, где введены $\lambda = l_T/l_C$ и отношение толщины t к ширине w консоли $\delta = t/w$. Как и для F_X , дисперсия X^C минимальна тоже в $x = 1$, где $\sigma_{X^C} = (2\lambda^2 + \delta^2)l_C^2 / (2l_T) \sqrt{\beta^2(1)\sigma_x^2 + \sigma_\beta^2}$.

Угол изгиба консоли α — это квадратичная функция x , коэффициенты которой выражаются через F_Y и F_Z либо через компоненты Y^C и Z^C вектора r^C (рис. 1), [15]:

$$\alpha(x) = \frac{3F_Z + 3\lambda F_Y}{k_C l_C} x - \frac{3F_Z}{2k_C l_C} x^2 = \left(\frac{6Z^C}{l_C} - \frac{2Y^C}{l_T} \right) x - \left(\frac{6Z^C}{l_C} - \frac{3Y^C}{l_T} \right) x^2. \quad (1)$$

Обозначив $\alpha(x) = y$, запишем (1) в общем виде

$$y = ax - bx^2; \quad a = \bar{a} = \frac{3F_Z + 3\lambda F_Y}{k_C l_C} = \underline{a} = \frac{6\lambda Z^C - 2Y^C}{l_T}, \quad b = \bar{b} = \frac{3F_Z}{2k_C l_C} = \underline{b} = \frac{6\lambda Z^C - 3Y^C}{l_T}. \quad (2)$$

Буквенные величины, относящиеся к смещению, условно, подчеркнуты, а к силе — приведены с чертой

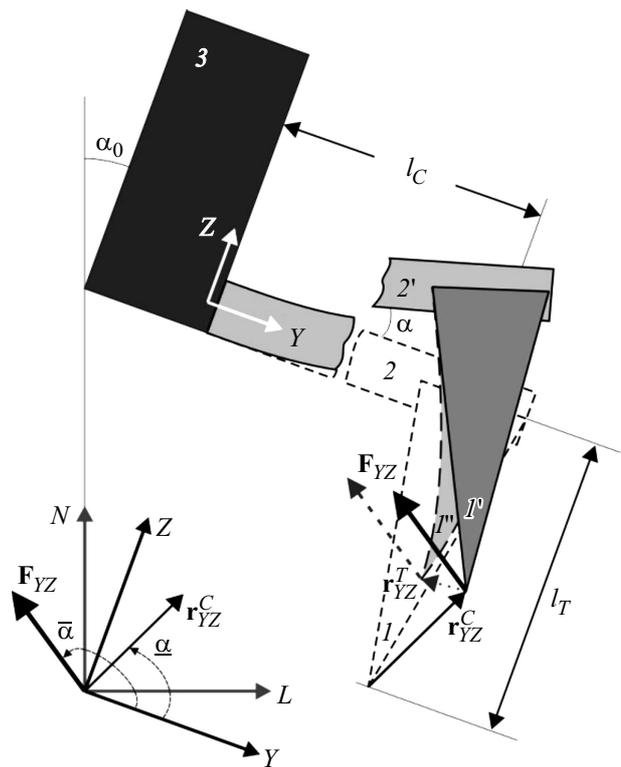


Рис. 1. Деформации АСМ-кантилевера. В отсутствие силы зонд (1) и консоль (2) не изогнуты. После приложения силы F_{YZ} : зонд (1'') кантилевера деформировался, r_{YZ}^T , консоль (2') деформировалась, условно недеформируемый зонд (1') „идеального кантилевера“ сместился, r_{YZ}^C ; недеформируемый держатель кантилевера (3) остался на месте. Системы координат XYZ и XLN привязаны к кантилеверу и соответственно к сканеру (ось X направлена на читателя); α_0 — угол отклонения держателя кантилевера от вертикали (например, $\approx 20^\circ$ в приборах НТ-МДТ СИ, Россия и $\approx 10^\circ$ — Bruker, США); α — угол изгиба консоли в выбранной точке; $\bar{\alpha}$ и $\underline{\alpha}$ — полярные углы векторов F_{YZ} и r_{YZ}^C ; l_C — длина консоли; l_T — высота зонда.

сверху. Ниже другие величины, обозначенные одинаковой буквой, но с чертой сверху или снизу, могут отличаться друг от друга.

Для однозначного определения коэффициентов a и b в (2) необходимо измерить значения y_1 и y_2 в двух разных положениях на консоли, x_1 и x_2 :

$$\begin{cases} a = \frac{1}{(x_2 - x_1)} \left(x_2 \frac{y_1}{x_1} - x_1 \frac{y_2}{x_2} \right), \\ b = \frac{1}{(x_2 - x_1)} \left(\frac{y_1}{x_1} - \frac{y_2}{x_2} \right). \end{cases} \quad (3)$$

Сформулируем математическую задачу: для заданных ошибок измерений $\sigma_{y_1}, \sigma_{y_2}, \sigma_{x_1}, \sigma_{x_2}$ найти такие $x_{1(ext)}$ и $x_{2(ext)}$, чтобы σ_a и σ_b , ошибки определения a и b по формулам (3) были минимальными.

Частный случай этой задачи ($\sigma_{y_1} = \sigma_{y_2}, \sigma_{x_1} = \sigma_{x_2}$) решен в разд. 3 Математическое приложение. Для общ-

Таблица 1. Коэффициенты полиномов $\bar{p} = \sum_{i=0}^4 \bar{a}_i v^i$ и $\underline{p} = \sum_{i=0}^4 \underline{a}_i v^i$, корни которых на отрезке $v \in [0; 1]$ соответствуют $\bar{x}_{1(extr)}(\bar{\alpha})$ и $\underline{x}_{1(extr)}(\underline{\alpha})$

\bar{a}_0	$-(\sin \bar{\alpha} + \lambda \cos \bar{\alpha})^2 - \bar{C}^2$	\underline{a}_0	$-(3\lambda \sin \underline{\alpha} - \cos \underline{\alpha})^2 - \underline{C}^2$
\bar{a}_1	$(\sin \bar{\alpha} + \lambda \cos \bar{\alpha})(3 \sin \bar{\alpha} + 2\lambda \cos \bar{\alpha}) + 2\bar{C}^2$	\underline{a}_1	$(3\lambda \sin \underline{\alpha} - \cos \underline{\alpha})(12\lambda \sin \underline{\alpha} - 5 \cos \underline{\alpha}) + 2\underline{C}^2$
\bar{a}_2	$-3 \sin \bar{\alpha}(\sin \bar{\alpha} + \lambda \cos \bar{\alpha})$	\underline{a}_2	$-9(2\lambda \sin \underline{\alpha} - \cos \underline{\alpha})(3\lambda \sin \underline{\alpha} - \cos \underline{\alpha})$
\bar{a}_3	$0.81(\bar{C}^2 + \lambda^2 \cos^2 \bar{\alpha}) + \sin^2 \bar{\alpha}$	\underline{a}_3	$0.34(\underline{C}^2 + (3\lambda \sin \underline{\alpha} - 2 \cos \underline{\alpha})^2) + 9(2\lambda \sin \underline{\alpha} - \cos \underline{\alpha})^2$
\bar{a}_4	$0.19(\bar{C}^2 + \lambda^2 \cos^2 \bar{\alpha})$	\underline{a}_4	$0.66(\underline{C}^2 + (3\lambda \sin \underline{\alpha} - 2 \cos \underline{\alpha})^2)$

Примечание. Измеряется угол изгиба консоли $\alpha = y$, $\bar{C} = (k \times k_C l_C / (3|F_{YZ}|))$ и $\underline{C} = k \times l_C / (2|r_{YZ}^C|)$; дифференциальный угол изгиба консоли $\delta\alpha/\delta N = y$, $\bar{C} = k \times k_C l_C / (3|\delta F_{YZ}/\delta N|)$ и $\underline{C} = k \times l_C / (2|\delta r_{YZ}^C/\delta N|)$. Углы $\bar{\alpha}$ и $\underline{\alpha}$ определяют в плоскости YZ направления силы взаимодействия зонд-образец и смещения зонда „идеального кантилевера“.

ности анализировалась линейная комбинация дисперсий $M(x_1, x_2) = \cos^2 \theta \sigma_a^2 + \sin^2 \theta \sigma_b^2$ (см. (П5)); расчет вспомогательного параметра θ показан в разд. 3.5. Доказано, что одна координата минимума $M(x_1, x_2)x_{2(extr)} = 1$, а другая $x_{1(extr)}$, определяется как корень полинома четвертой степени (см. (П41), (П16) и (П26), (П47а)):

$$P = \sum_{i=0}^4 a_i v^i = \cos^2 \theta (k^2 + (2b - a)^2) v^4 + (\sin^2 \theta (k^2 + (2b - a)^2) + 4b^2) v^3 - 6abv^2 + 2(k^2 + ab + a^2)v - (k^2 + a^2) = 0, \quad v \in [0; 1], \quad (4a)$$

где коэффициент $k = \sigma_y/\sigma_x$, $\sigma_y = \sigma_a$ и $\sigma_x = \sigma_b$ — это ошибки измерений угла изгиба и нормированной координаты фокуса. Корень (4a) сильно зависит от a/k и b/k , а от θ слабо (см. разд. 3).

Коэффициенты \bar{a} и \underline{b} в (2) выражаются через амплитуду вектора $|F_{YZ}|$ и угол $\bar{\alpha}$ между ним и направлением +Y (рис. 1):

$$\begin{cases} \bar{a} = \frac{3|F_{YZ}|}{k_C l_C} (\sin \bar{\alpha} + \lambda \cos \bar{\alpha}), \\ \bar{b} = \frac{3|F_{YZ}|}{2k_C l_C} \sin \bar{\alpha}. \end{cases} \quad (4b)$$

Подстановка (4b) и значения $\bar{\theta}$ из (П48) в (4a) дает полином $\bar{p} = \sum_{i=0}^4 \bar{a}_i v^i$, формулы коэффициентов \bar{a}_i которого внесены в левую часть табл. 1. У этого полинома на отрезке $[0; 1]$ всегда есть корень $v = \bar{x}_{1(extr)}$, и он является функцией $\bar{\alpha}$.

Угловые диаграммы $\bar{x}_{1(extr)}(\bar{\alpha})$ приведены на рис. 2, а. Их форма зависит от величины параметра $\bar{C} \propto k$ (табл. 1). Когда $\bar{C} = k = 0$, диаграмма напоминает заостренную сверху и снизу восьмерку. Случай соответствует $\sigma_y/\sigma_x = \sigma_a/\sigma_b = 0$, когда ошибка определения значений компонент силы зависит только от разброса положения фокуса лазера ОР. Для $1/\bar{C} = 1/k = 0$, $\sigma_x/\sigma_y = 0$, только разброс значений угла изгиба определяет эту ошибку [13], и диаграмма — это окружность $x \approx 0.464$.

Если на рис. 2, а через начало координат провести прямую вдоль вектора F_{YZ} , то в точке на расстоянии $\bar{x}_{1(extr)}$ от центра она пересечет диаграмму с характеризующим эксперимент значением \bar{C} . Вместе с $x_{2(extr)} = 1$ — это два оптимальных нормированных положения фокуса лазера ОР для определения F_Z и F_Y компонент, а также (см. начало этого раздела) F_X компоненты силы.

Если направление силы неизвестно, можно использовать точку пересечения диаграммы $\bar{x}_{1(extr)}(\bar{\alpha})$ с прямой, идущей через начало координат вдоль локальной нормали к поверхности образца, и измерить F_Y и F_Z приблизительно. Определенный таким образом приблизительный вектор F_{YZ} дает следующее приближение для направления секущей прямой, и производится уточняющее измерение F_Y и F_Z .

Если вектор r_{YZ}^C задать амплитудой $|r_{YZ}^C|$ и углом $\underline{\alpha}$ с направлением +Y (рис. 1), выражения для \underline{a} и \underline{b} в (2) преобразуются к

$$\begin{cases} \underline{a} = \frac{2|r_{YZ}^C|}{\lambda l_C} (3\lambda \sin \underline{\alpha} - \cos \underline{\alpha}), \\ \underline{b} = \frac{3|r_{YZ}^C|}{\lambda l_C} (2\lambda \sin \underline{\alpha} - \cos \underline{\alpha}). \end{cases} \quad (4c)$$

Используя в (4a) $\underline{\theta}$ из (П49) и (4c), были получены (см. правую часть табл. 1) коэффициенты полинома $\underline{p} = \sum_{i=0}^4 \underline{a}_i v^i$ — для расчетов корня $v = \underline{x}_{1(extr)}(\underline{\alpha})$.

Диаграммы $\bar{x}_{1(extr)}(\bar{\alpha})$ и $\underline{x}_{1(extr)}(\underline{\alpha})$ с конечными значениями параметров \bar{C} и \underline{C} (рис. 2) отличаются. В частности, для почти всех направлений силы $\bar{x}_{1(extr)} > 0.464$, а для большинства направлений смещения $\underline{x}_{1(extr)} < 0.464$.

Определим связь между $\bar{\alpha}$ и $\underline{\alpha}$. В (4b) и (4c) $\bar{a} = \underline{a}$ и $\bar{b} = \underline{b}$, откуда получаем:

$$\text{tg } \underline{\alpha} = (3\lambda + 2 \text{tg } \bar{\alpha}) / (6\lambda^2 + 3\lambda \text{tg } \bar{\alpha}). \quad (5)$$

Например, для $\lambda = 0.2$, отрезки $\underline{\alpha} \in [\arctg(1/2\lambda); \arctg(2/3\lambda)] \cong [68.2^\circ; 73.3^\circ]$ и $\bar{\alpha} \in [0^\circ; 90^\circ]$, соответствую

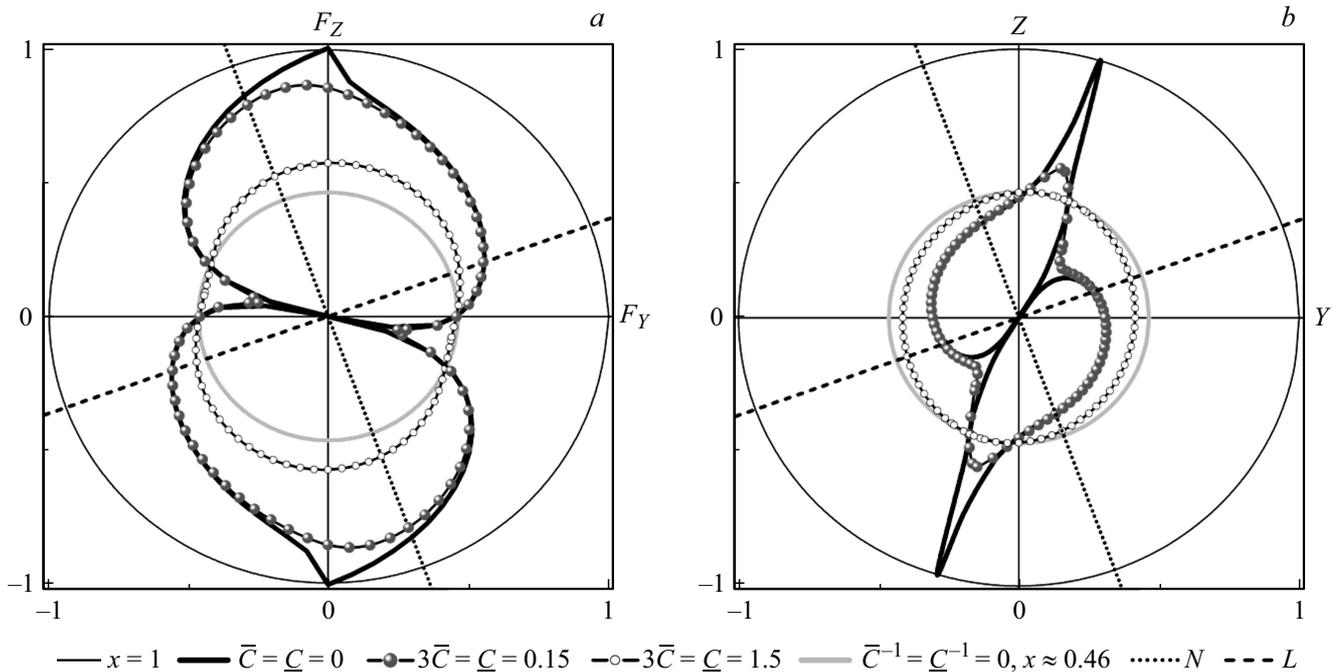


Рис. 2. *a* — диаграммы $\bar{x}_{1(extr)}(\bar{\alpha})$ для четырех значений параметра \bar{C} (табл. 1 и формулы (7)); $\bar{\alpha}$ — полярный угол \mathbf{F}_{YZ} . *b* — диаграммы $\underline{x}_{1(extr)}(\underline{\alpha})$ для 4-х значений параметра \underline{C} ; $\underline{\alpha}$ — полярный угол \mathbf{r}_{YZ}^C . Диаграмма $x_{2(extr)}$ — окружность $x = 1$; вертикаль, горизонталь — прямые N, L . Расчеты для кантилевера с $\lambda = 0.2$ и угла $\alpha_0 = 20^\circ$ велись в Mathcad 15 (ПТС, США).

друг другу, отличаются длиной и положением начальной точки. Такого рода деформации и смещения при отображении $\bar{\alpha}$ на $\underline{\alpha}$ проявляются в отличиях диаграмм $\bar{x}_{1(extr)}(\bar{\alpha})$ для \mathbf{F} и $\underline{x}_{1(extr)}(\underline{\alpha})$ для \mathbf{r}^C (рис. 2).

Диаграммы $\bar{x}_{1(extr)}(\bar{\alpha})$ применимы для оптимизации измерений компонент силы с помощью реального кантилевера с прямоугольной консолью. Диаграммы $\underline{x}_{1(extr)}(\underline{\alpha})$ предназначены для „идеального кантилевера“. У жестких кантилеверов при работе в контактом режиме смещение острия зонда заметно отличается от смещения зонда „идеального кантилевера“ \mathbf{r}_{YZ}^C , так как величина изгибной жесткости кремниевого зонда ($\sim 10 \text{ N/m}$ [15,17,18]) сопоставима с жесткостью консоли. На схеме реального кантилевера на рис. 1 это демонстрирует вектор деформации зонда \mathbf{r}_{YZ}^T .

2. Экспериментальная верификация результатов

2.1. АСМ измерения $\alpha(N), \beta(N), \delta\alpha(x)/\delta N, \delta\beta(x)/\delta N$ зависимостей

В схеме ОР сигнал DFL (deflection), разности фототоков в верхней и нижней половинах фотодетектора (ФД) линейно связан с углом изгиба консоли α , а сигнал LF (lateral force), разности фототоков в левой и правой половинах ФД — с углом кручения консоли β [19]. Сигналы DFL и LF выводятся в условных единицах. Для отображения в радианах нужно определить коэффициенты перевода $C_1 = \delta\alpha/\delta DFL$ и $C_{1*} = \delta\beta/\delta LF$.

В АСМ можно детектировать зависимости $DFL(N)$ и $LF(N)$ (вертикальное смещение образца N регулируется сканером). Обычно это линейные зависимости с коэффициентами наклона $C_2 = \delta DFL/\delta N$ и $C_{2*} = \delta LF/\delta N$.

Произведения $C_1 C_2$ и $C_{1*} C_{2*}$ составляют дифференциальные сигналы $\delta\alpha/\delta N$ и $\delta\beta/\delta N$, которые, как и сигналы DFL и LF, зависят от $x = Y/l_C$, нормированной координаты фокуса лазера. При анализе данных $\delta\alpha(x)/\delta N$ и $\delta\beta(x)/\delta N$ вектора и компоненты силы и смещения в соотношениях теоретического раздела следует заменить на их производные по N . Например, силу \mathbf{F}_{YZ} и смещение \mathbf{r}_{YZ}^C замещают дифференциальные сила $\delta\mathbf{F}_{YZ}/\delta N$ и смещение $\delta\mathbf{r}_{YZ}^C/\delta N$.

Использовался атомно-силовой микроскоп Интегра Аура (НТ–МДТ СИ) в конфигурации сканирование образцом. Положение ФД в горизонтальной плоскости регулировали подпружиненные винты с шагом резьбы 0.35 mm. В результате изгиба консоли изменения угла отражения света лазера ОР от нее в два раза больше, чем сам угол изгиба [2]. Угол между лучами из вершины на кантилевере в концы отрезка, отмечающего два положения центра ФД, обратно пропорционален длине оптического рычага, 25 mm [15]. С учетом наклона плоскости ФД на оборот винта,двигающего его вдоль консоли, приходится угол $\delta\alpha = \cos 20^\circ \cdot 0.35/(2 \cdot 25) \cong 6.58 \cdot 10^{-3} \text{ rad}$, а на оборот винта,двигающего его поперек консоли, — угол $\delta\beta = 0.35/50 = 7 \cdot 10^{-3} \text{ rad}$. Используя это, C_1 и C_{1*} определялись с относительной точностью около 4% (1/24 оборота винта).

Положение фокуса лазера на консоли, Y , измерялось по углу поворота винта,двигающего столик с держателем кантилевера вдоль консоли. С учетом плеча силы (≈ 51 mm), которой винт толкает столик, и расстояния от оси вращения столика до кантилевера (≈ 34 mm), один оборот винта с шагом резьбы 0.35 mm смещает кантилевер на ≈ 240 μm . Это позволяло измерять Y с точностью 10 μm ($1/24$ оборота винта). Линия закрепления консоли на чипе, $Y = 0$, определялась по падению в два раза суммарной интенсивности излучения лазера, отраженного консолью в четыре секции ФД (сигнал *Laser*) [14,15,18]. Длина l_C измерялась с точностью 1 μm в оптическом микроскопе по расстоянию от линии закрепления до пересечения оси зонда и консоли.

В теоретическом разделе отмечалось, что угол β (либо дифференциальный угол $\delta\beta/\delta N$) однозначно задает F_X ($\delta F_X/\delta N$) и X^C ($\delta X^C/\delta N$). Ниже рассматриваются особенности более сложных измерений и трактовки значений $\delta\alpha/\delta N$.

2.2. Расчет $\bar{x}_{1(extr)}$ и $\underline{x}_{1(extr)}$, характеризующие эксперимент параметры \bar{C} и \underline{C}

Расчет $\bar{x}_{1(extr)}$ и $\underline{x}_{1(extr)}$ как корней полиномов табл. 1 можно проводить, если выполнены два условия: 1) $\sigma_{x_1} = \sigma_{x_2} = \sigma_x$, 2) $\sigma_{y_1} = \sigma_{y_2} = \sigma_y$, — случай равных дисперсий, см. (П3). В эксперименте дисперсии измеряемых величин $x = Y/l_C$, $y(x) = \delta\alpha(x)/\delta N = C_1 C_2(x)$ и отношение k , определяющее \bar{C} и \underline{C} , рассчитывались следующим образом:

$$\begin{cases} \sigma_x = \frac{Y}{l_C} \sqrt{\frac{\sigma_Y^2}{Y^2} + \frac{\sigma_{l_C}^2}{l_C^2}} \approx \frac{\sigma_Y}{l_C} = \text{const}, \\ \sigma_y = \frac{\delta\alpha}{\delta N} \sqrt{\frac{\sigma_{C_1}^2}{C_1^2} + \frac{\sigma_{C_2}^2}{C_2^2}} \approx C_2 \sigma_{C_1} = \frac{\delta\alpha}{\delta N} \frac{\sigma_{C_1}}{C_1}, \\ k = \frac{\sigma_y}{\sigma_x} \approx \frac{\delta\alpha}{\delta N} \frac{l_C \sigma_{C_1}}{C_1 \sigma_Y}. \end{cases} \quad (6)$$

Первое условие выполнялось строго, так как $\sigma_Y \approx 10$ μm и от x не зависит, $\sigma_{l_C} < 1$ μm , $Y \leq l_C$. Поскольку C_1 не зависит от x , второе условие выполняется для $\sigma_{C_2} = \text{const}$, когда $\sigma_{C_1}/C_1 \ll \sigma_{C_2}/C_2$. Однако из-за фиксированного $\sigma_{C_1}/C_1 = 1/24$, это приводит к большой σ_y . Добиваясь $\sigma_{C_2}/C_2 \ll \sigma_{C_1}/C_1$, увеличив число измерений, мы снижали σ_y до предельного значения, ограниченного отношением сигнал/шум $(\delta\alpha/\delta N)/\delta_y = C_1/\sigma_{C_1} = 24$. В результате из-за отличий $\delta\alpha(x_1)/\delta N$ и $\delta\alpha(x_2)/\delta N$ второе условие строго не выполнялось.

Рассмотрим экспериментальную зависимость $\alpha(N)$ на вставке рис. 3, *a*. Анализ сигнала на линейном, контактном участке дает: $\sigma_\alpha \approx 2.8$ μrad ; шум-координаты $\sigma_N \approx 0.1$ nm; высота и ширина участка 150 μrad и 18 nm. Таким образом, $\sigma_{C_2}/C_2 = \sqrt{(2.8/150)^2 + (1/180)^2} \ll \sigma_{C_1}/C_1 = 1/24$. Следова-

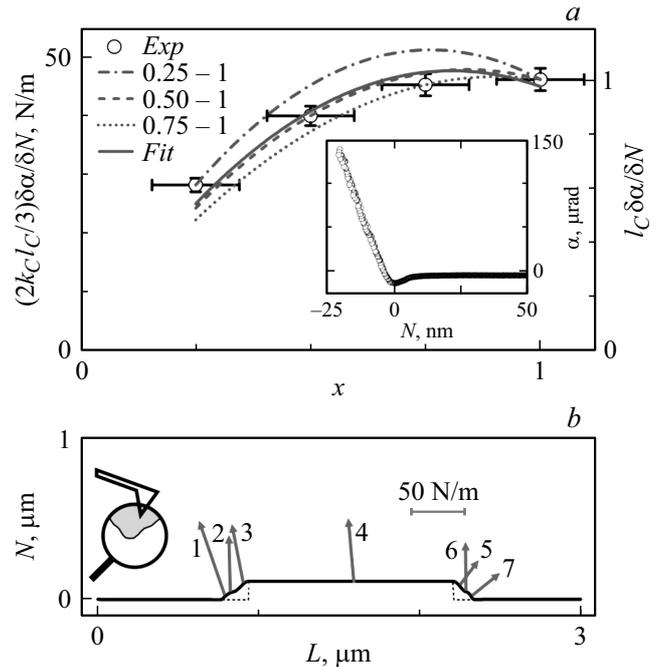


Рис. 3. *a* — профиль дифференциального угла изгиба консоли для контакта АСМ-зонда на горизонтальном участке выступа решетки TGZ2, *Exp*. Модельные зависимости, точно проходящие через две точки измерений: $x_1 = 0.25$ и $x_2 = 1$, $0.25 - 1$; $x_1 = 0.5$ и $x_2 = 1$, $0.5 - 1$; $x_1 = 0.75$ и $x_2 = 1$, $0.75 - 1$. Подгонка модельной зависимости ко всему профилю, *Fit*. Вставка: разгрузочная кривая $\alpha(N)$, $x = 0.5$. *b* — измеренный профиль высоты выступа (отображается полусумма сигналов в прямом и обратном направлениях сканирования), — сплошная линия; истинный рельеф — пунктир. Схема слева: расположение кантилевера, возможная форма острия. Стрелки 1–7 на участках разного наклона изображают вектор $\delta F_{YZ}/\delta N$, табл. 2, $x_1 = 0.75$ и $x_2 = 1$. Углы между направлением $+L$ и стрелками меньше $\bar{\alpha}$ табл. 2 на α_0 . Использовался кантилевер RTESPA-300 ($l_C = 105$ μm , $\lambda = 0.2$, $k_C = 69$ N/m); $\alpha_0 = 20^\circ$.

тельно, можно не учитывать вклад σ_{C_2}/C_2 в σ_y и $\sigma_y \approx \delta\alpha/\delta N (\sigma_{C_1}/C_1)$, как приведено в (6).

Используя выражение для k в (6), получаются необходимые при расчете коэффициентов полиномов в табл. 1 формулы для \bar{C} и \underline{C} :

$$\begin{cases} \bar{C} \approx \frac{\sigma_{C_1}/C_1}{\sigma_Y/l_C} \frac{k_C l_C (\delta\alpha/\delta N)}{3 |\delta F_{YZ}/\delta N|}, \\ \underline{C} \approx \frac{\sigma_{C_1}/C_1}{\sigma_Y/l_C} \frac{\lambda l_C (\delta\alpha/\delta N)}{2 |\delta r_{YZ}^C/\delta N|}. \end{cases} \quad (7)$$

В эксперименте $l_C = 1.05 \cdot 10^{-4}$ m и $\lambda = l_T/l_C = 0.2$, согласно данным оптического микроскопа с объективом с $NA = 0.8$; жесткость $k_C = 69$ N/m, определялась методом Садера [20]. Подставляя эти значения и $\sigma_Y = 10^{-5}$ m, $\sigma_{C_1}/C_1 = 1/24$, $|\delta F_{YZ}/\delta N| \approx k_C$, $l_C (\delta\alpha/\delta N) \approx 3/2$, $|\delta r_{YZ}^C/\delta N| \approx 1$ в (7), получаем характеризующие эксперимент оценочные значения параметров: $\bar{C} \approx 0.219$ и $\underline{C} \approx 0.066$. В качестве примера для

вертикальной силы F_{YZ} ($\bar{\alpha} = 110^\circ$) были рассчитаны коэффициенты полинома в левой половине табл. 1 и определено, что $\bar{x}_{1(extr)} \cong 0.67$. Согласно уравнению (5), направление вектора смещения, соответствующего вертикальной силе F_{YZ} , задается углом $\underline{\alpha} \cong 74^\circ$. Вычисляя коэффициенты полинома в правой половине табл. 1, было получено, что $\underline{x}_{1(extr)} \cong 0.69$.

2.3. Расчет компонент F и r^C по АСМ данным

Взяв в (2), вместо компонент силы и вектора смещения „идеального кантилевера“, дифференциальные компоненты, комбинируя результат с (3), можно связать их со значениями $y = \delta\alpha/\delta N$ в паре точек x_1, x_2 :

$$\begin{cases} \frac{\delta F_Y}{\delta N} = \frac{k_c l_c}{3\lambda(x_2 - x_1)} \left\{ (x_2 - 2) \frac{y_1}{x_1} - (x_1 - 2) \frac{y_2}{x_2} \right\}, \\ \frac{\delta F_Z}{\delta N} = \frac{2k_c l_c}{3(x_2 - x_1)} \left\{ \frac{y_1}{x_1} - \frac{y_2}{x_2} \right\}, \\ \frac{\delta Y^C}{\delta N} = \frac{\lambda l_c}{x_2 - x_1} \left\{ (x_2 - 1) \frac{y_1}{x_1} - (x_1 - 1) \frac{y_2}{x_2} \right\}, \\ \frac{\delta Z^C}{\delta N} = \frac{l_c}{6(x_2 - x_1)} \left\{ (3x_2 - 2) \frac{y_1}{x_1} - (3x_1 - 2) \frac{y_2}{x_2} \right\}. \end{cases} \quad (8)$$

По (8) рассчитывались данные для пар точек в табл. 2 и 3. По ортогональным компонентам силы и смещения определялись значения углов

$$\underline{\alpha} = \arctg((\delta Z^C/\delta N)/(\delta Y^C/\delta N)),$$

$$\bar{\alpha} = \arctg((\delta F_Z/\delta N)/(\delta F_Y/\delta N))$$

и амплитуд

$$|\delta r_{YZ}^C/\delta N| = \sqrt{(\delta Y^C/\delta N)^2 + (\delta Z^C/\delta N)^2},$$

$$|\delta F_{YZ}/\delta N| = \sqrt{(\delta F_Y/\delta N)^2 + (\delta F_Z/\delta N)^2},$$

которые также нужны для вычислений \bar{C} и \underline{C} по формулам (7).

Для всех точек измеренного профиля $\delta\alpha(x)/\delta N$ (рис. 3, а) и данные секций *Fit* в табл. 2 и 3, значения $|\delta r_{YZ}^C/\delta N|$, $|\delta F_{YZ}/\delta N|$, $\bar{\alpha}$, $\underline{\alpha}$ определялись как параметры подгонки зависимостями, следующими из уравнений (2), (4b) и (4c):

$$l_c \frac{\delta\alpha(x)}{\delta N} = \left| \frac{\delta r_{YZ}^C}{\delta N} \right| \left[(6 \sin \underline{\alpha} - (2/\lambda) \cos \underline{\alpha})x - (6 \sin \underline{\alpha} - (3/\lambda) \cos \underline{\alpha})x^2 \right], \quad (9)$$

$$\frac{2k_c l_c}{3} \frac{\delta\alpha(x)}{\delta N} = \left| \frac{\delta F_{YZ}}{\delta N} \right| \left[(2 \sin \bar{\alpha} + 2\lambda \cos \bar{\alpha})x - \cos \bar{\alpha}x^2 \right]. \quad (10)$$

Как правило, в контактных АСМ измерениях угол изгиба кантилевера α линейно связан с изменениями вертикального положения образца, координаты N . Произведения определенных по (8)–(10) дифференциальных компонент силы и смещения на ΔN , ширину линейной, контактной области на кривой $\alpha(N)$ дают значения самих компонент.

2.4. Результаты эксперимента и обсуждение

Одномерная тестовая решетка TGZ2 прямоугольных выступов высотой 110 nm, чередующихся с периодом 3 μm , исследовалась в атомно-силовом микроскопе. Кантилевер устанавливался поперек выступов (вставка на рис. 3, b). Топография рельефа измерялась в режиме прерывистого контакта. Профиль высоты выступа на рис. 3, b получен с помощью кантилевера RTESPA-300, резонировавшего на частоте 368 kHz с рабочей амплитудой вибраций 8 nm (амплитуда свободных вибраций 10 nm), лазер ОР был сфокусирован в точку $x = 0.5$.

На вставке рис. 3, a показана разгрузочная зависимость $\alpha(N)$, измеренная на горизонтальном участке 4 выступа (рис. 3, b). Угловой коэффициент ее линейного участка (статический контакт зонд–образец), $\delta\alpha/\delta N \cong 150 \mu\text{rad}/18 \text{ nm} \cong 8300 \text{ rad/m}$, умноженный на длину консоли, $1.05 \cdot 10^{-4} \text{ m}$, дает ординату $\cong 0.87$ точки с $x = 0.5$ на профиле дифференциального угла изгиба (рис. 3, a), правая ось. Ордината этой же точки на левой оси $0.87 \cdot 2 \cdot 69/3 \cong 40 \text{ N/m}$. Таким путем по средним угловым коэффициентам разгрузочно-нагрузочных зависимостей $\alpha(N)$ в 4-х значениях x были построены профили дифференциального угла изгиба на всех семи участках рельефа выступа, указанных на рис. 3, b.

Для расчета амплитуд $|\delta r_{YZ}^C/\delta N|$, $|\delta F_{YZ}/\delta N|$ и углов $\bar{\alpha}$, $\underline{\alpha}$ эти профили и все 28 значений дифференциального угла изгиба обрабатывались по методике разд. 2.3. Результаты сведены в табл. 2 и 3.

На вставке рис. 3, a ширина линейной, контактной области зависимости $\alpha(N)$ $\Delta N \cong 18 \text{ nm}$. Умножая дифференциальные амплитуды в табл. 2 и 3 на ΔN , получаем для пары $x_1 = 0.5$, $x_2 = 1$ на горизонтальном участке образца значения амплитуд $|F_{YZ}| = 86 \cdot 18 = 1.548 \mu\text{N}$ и $|r_{YZ}^C| = 0.77 \cdot 18 = 13.86 \text{ nm}$.

Проанализируем данные $\delta r_{YZ}^C/\delta N$ в табл. 2. Из геометрических соображений проекция этого вектора на ось N , $(\delta r_{YZ}^C/\delta N)_N = |\delta r_{YZ}^C/\delta N| \sin(\underline{\alpha} - \alpha_0)$, не может быть больше единицы. В табл. 2 серым цветом залиты ячейки 3-х пар с некорректными, с этой точки зрения, данными. (В табл. 3 для дифференциальной силы $\delta F_{YZ}/\delta N$ соответствующие пары исключены из результатов.) У оставшихся корректных 3-х пар $x_2 = 1$ совпадает с теоретическим $x_{2(extr)}$, вторым оптимальным положением фокуса, строго обоснованным в разд. 3.

Для этих пар и для данных в секции *Fit* значения угла $\underline{\alpha}$ лежат в диапазоне $[71.9^\circ; 77.7^\circ]$ вокруг пика диаграммы (рис. 2, b) (на пике $\underline{\alpha} \cong 73.3^\circ$, согласно (5), для

Таблица 2. Компоненты $\delta r_{YZ}^C/\delta N$, определенные по данным дифференциального угла изгиба консоли $\delta\alpha/\delta N$ для шести пар¹ нормированных позиций фокуса лазера системы ОР и по всем данным² $\delta\alpha(x)/\delta N$ измеренного профиля

$x_1;$ x_2	Компоненты	Участки разного наклона на профиле высоты, рис. 3, b						
		1	2	3	4	5	6	7
0.75; 1	$ \delta r_{YZ}^C/\delta N $	0.67	0.68	0.61	0.73	0.45	0.59	0.46
	$\underline{\alpha}, \text{ }^\circ$	75.0	74.0	74.5	74.2	72.3	74.0	71.9
0.5; 1	$ \delta r_{YZ}^C/\delta N $	0.69	0.74	0.71	0.77	0.49	0.64	0.53
	$\underline{\alpha}, \text{ }^\circ$	75.5	75.3	76.7	74.9	74.0	75.1	74.2
0.25; 1	$ \delta r_{YZ}^C/\delta N $	0.80	0.82	0.76	0.85	0.54	0.72	0.58
	$\underline{\alpha}, \text{ }^\circ$	77.6	76.7	77.7	76.3	75.7	76.9	75.6
0.5; 0.75	$ \delta r_{YZ}^C/\delta N $	1.45	1.53	1.47	1.60	0.99	1.32	1.06
	$\underline{\alpha}, \text{ }^\circ$	83.7	84.3	86.1	83.7	83.8	84.1	84.4
0.25; 0.75	$ \delta r_{YZ}^C/\delta N $	1.32	1.32	1.23	1.37	0.85	1.16	0.90
	$\underline{\alpha}, \text{ }^\circ$	85.2	84.6	85.8	83.8	84.0	84.8	84.3
0.25; 0.5	$ \delta r_{YZ}^C/\delta N $	2.94	3.00	2.95	3.07	1.92	2.62	2.05
	$\underline{\alpha}, \text{ }^\circ$	90.6	89.2	88.8	88.8	89.1	89.8	88.7
<i>Fit</i>	$ \delta r_{YZ}^C/\delta N $	0.71	0.74	0.69	0.77	0.49	0.64	0.52
	$\underline{\alpha}, \text{ }^\circ$	76.3	75.7	77.0	75.4	74.5	75.7	74.5

Примечание. ¹ Расчет для пар точек x_1 и x_2 по (8). ² Расчет для всех точек *Fit* по (9).

Таблица 3. Компоненты $\delta F_{YZ}/\delta N$, определенные по данным $\delta\alpha/\delta N$ для трех пар¹ точек с $x_2 = 1$ и по всем данным² $\delta\alpha(x)/\delta N$ измеренного профиля

x_1	Компоненты	Участки разного наклона на профиле высоты, рис. 3, b						
		1	2	3	4	5	6	7
0.75	$ \delta F_{YZ}/\delta N , \text{ N/m}$	76	55	58	63	30	47	35
	$\bar{\alpha}, \text{ }^\circ$	129	111	121	114	53	111	39
	$\bar{x}_{1(extr)}, \text{ расчет}^3$	0.69	0.70	0.70	0.72	0.64	0.70	0.61
0.5	$ \delta F_{YZ}/\delta N , \text{ N/m}$	92	92	128	86	39	74	45
	$\bar{\alpha}, \text{ }^\circ$	134	132	142	128	111	140	116
	$\bar{x}_{1(extr)}, \text{ расчет}^3$	0.68	0.69	0.64	0.70	0.73	0.63	0.71
0.25	$ \delta F_{YZ}/\delta N , \text{ N/m}$	173	149	168	138	76	134	80
	$\bar{\alpha}, \text{ }^\circ$	146	143	146	140	136	143	136
	$\bar{x}_{1(extr)}, \text{ расчет}^3$	0.61	0.64	0.61	0.66	0.68	0.64	0.68
<i>Fit</i>	$ \delta F_{YZ}/\delta N , \text{ N/m}$	119	107	135	101	48	92	52
	$\bar{\alpha}, \text{ }^\circ$	141	137	144	134	123	137	124

Примечание. ¹ Расчет по (8). ² Расчет по (10). ³ Расчет по методике разд. 2.2.

$\lambda = 0.2$ и $\bar{\alpha} = 90^\circ$). Согласно (5), $\bar{\alpha} = 110^\circ$ переходит в $\underline{\alpha} \cong 74^\circ$. Это дает направление скольжения острия зонда „идеального кантилевера“ на горизонтальной поверхности, перемещающейся вертикально (трения нет, сила

действует строго вертикально). Значения $\underline{\alpha}$ в табл. 2 можно трактовать следующим образом. Когда решетка поднимается или опускается, острие зонда на горизонтальном участке выступа двигается по траектории

скольжения, а на левом и правом склонах выступа идет слегка выше или соответственно ниже этой траектории.

В каждой секции табл. 2, для 3-х пар с $x_2 = 1$ и *Fit*, величина $|\delta r_{YZ}^C / \delta N| < 1$ и максимальна на 4-м участке. Уменьшение $|\delta r_{YZ}^C / \delta N|$ на вертикальных краях выступа можно связать с проскальзыванием зонда на них, см. работу [18] о корректировке сигналов кажущейся жесткости и деформации на склонах рельефа однородного образца. Без учета деформации образца отличие $|\delta r_{YZ}^C / \delta N|$ от единицы на 4-м участке определяется дифференциальной деформацией $\delta r_{YZ}^T / \delta N$ (см. r_{YZ}^T на рис. 1).

Диапазоны углов $\bar{\alpha}$ вектора $\delta F_{YZ} / \delta N$ в табл. 3 и $\underline{\alpha}$ вектора $\delta r_{YZ}^C / \delta N$ в табл. 2 заметно отличаются. Отметим, что в обычном анализе кривых $DFL(N)$ [21] сила действует вертикально, $\bar{\alpha} = 110^\circ$, $|\delta F_{YZ} / \delta N| = k_C = 69 \text{ N/m}$, и получается результат, не зависящий от наклона образца и положения фокуса лазера на консоли.

Для всех 4-х случаев табл. 3 поведение $\bar{\alpha}$ на разных участках выступа качественно похоже. Наиболее ярко его демонстрируют данные пары $x_1 = 0.75$ и $x_2 = 1$, отображенные также семью стрелками на рис. 3, *b*. В сравнении с горизонтальным 4-м участком, на краях выступа растет боковая сила. Это согласуется с представлением, что острый зонд давит на плоский горизонтальный участок выступа вертикально, а острый край выступа давит на боковую поверхность зонда под углом.

На схеме кантилевера (рис. 3, *b*) у зонда почти вертикальная задняя (слева) и наклоненная передняя (справа) стороны. По инструментальному уширению вертикальных участков выступа решетки TGZ2 в профиле АСМ-сигнала высоты можно восстановить форму самого острия зонда [21]. Результат этой оценочной процедуры показан на схеме слева на рис. 3, *b*: кончик зонда выглядит затупившимся, сохранив асимметрию. Предположение, что такой зонд сильнее проскальзывает на правом, чем на левом краю выступа можно проверять по ослаблению взаимодействия. Амплитуда дифференциальной силы, длина стрелок на рис. 3, *b* на правом краю, действительно, заметно меньше, чем на 4-м горизонтальном участке и левом краю выступа. Однако максимальна она не на 4-м, а на 1-м участке, на левом краю.

На качественном уровне, $|\delta F_{YZ} / \delta N|$ можно моделировать как АСМ-сигнал жесткости, см. уравнение (11а) в [18]. В [18] учитывался, в частности, наклон консоли и локальный рельеф образца, но явно не брался в расчет вклад геометрии острия зонда. Если пренебречь вкладом жесткости самого зонда, такое моделирование показывает максимум сигнала на левом и минимум на правом краю выступа. Для кантилевера, развернутого параллельно выступам решетки, предсказывается падение сигнала на обоих краях выступа относительно горизонтального участка независимо от вклада жесткости самого зонда. В такой связи мы полагаем, что наблюдаемое поведение амплитуды дифференциальной

силы (рис. 3, *b* и табл. 3) главным образом, связано с выбранным расположением кантилевера, и частично с вертикальной асимметрией формы зонда.

На рис. 3, *a* кривая 0.5–1, точно проходящая через точки с абсциссами $x_1 = 0.5$ и $x_2 = 1$, практически совпадает с кривой *Fit*, подгонкой модели ко всему экспериментальному профилю, хотя, как и *Fit*, не пересекает область разброса значений точки $x = 0.75$. Кривая 0.75–1 идет немного ниже *Fit*, но пересекает области разброса значений точек $x = 0.5$ и 0.25 . Кривая 0.25–1 плохо согласуется с *Fit*, не пересекает область разброса значений точек $x = 0.75$ и касается такой области у точки $x = 0.5$. Это типичная картина для всех семи участков (табл. 3).

Используя значения компонент $\delta F_{YZ} / \delta N$ с разными x_1 , по методике разд. 2.2 были рассчитаны $\bar{x}_{1(extr)}$ в табл. 3. (По соответствующим данным в табл. 2 получаются $\underline{x}_{1(extr)}$, совпадающие с $\bar{x}_{1(extr)}$ во втором знаке). В секциях с $x_1 = 0.75, 0.5, 0.25$ средние по семи участкам $\langle x_{1(extr)} \rangle \cong 0.68, 0.68, 0.65$ соответственно. Использованное в измерениях значение $x_1 = 0.75$ ближе других к среднему расчетному 0.68 и к полусумме оценок, полученных в разд. 2.2, 0.68. Однако в табл. 3 данные секции с $x_1 = 0.5$, следующим значением по близости к 0.68, наилучшим образом согласуются с данными секции *Fit* и, в частности, описывают весь экспериментальный профиль на рис. 3, *a*.

В итоге, можно констатировать удовлетворительное согласие эксперимента по картированию компонент силы с результатами теоретического раздела. Отмеченные расхождения, как мы полагаем, связаны с неточностью значений σ_{C_1} / C_1 и σ_Y , примененных в расчетах $x_{1(extr)}$, и с не строгим выполнением в измерениях одного из условий (ПЗ), $\sigma_{y_1} = \sigma_{y_2}$.

Заключение

Для картирования векторов силы взаимодействия зонд–образец и смещения „идеального кантилевера“ с помощью атомно-силового микроскопа со схемой оптического рычага достаточно определить углы изгиба в двух точках на консоли кантилевера и угол кручения в одной из них. В работе исследованы вопросы проведения и оптимизации таких измерений. Доказано существование двух особых точек на прямоугольной консоли, в совокупности сводящих к минимуму ошибки измерений трех пространственных компонент силы и вектора смещения. Положение одной особой точки рассчитывается как корень полинома четвертой степени, аналитические выражения коэффициентов которого приведены в табл. 1, особенности расчета изложены в разд. 2.2. Другая особая точка находится на пересечении плоскости консоли с осью зонда.

На образце калибровочной решетки TGZ2 проведен демонстрационный эксперимент по картированию пространственных компонент силы, действующей на

АСМ-зонд. Полученные экспериментальные данные удовлетворительно согласуются с расчетами. Дальнейшее тестирование теории требует дополнительных измерений. Существенно проще такие эксперименты в новых квазистатических режимах АСМ — гибридном, Hybrid (НТ-МДТ СИ), PeakForce QNM (Bruker), fast force volume mapping (Asylum Research, США) — в основе работы которых лежат быстрые регистрация и анализ нагрузочно-разгрузочных зависимостей $DFL(N)$.

Результаты работы представляются важными для развития наномеханических АСМ-исследований. Знание амплитуды и направления действующей силы необходимо для измерений методом испытаний на изгиб модуля Юнга наномостиков, при изучении свойств прикрепленных к зонду нанообъектов, в экспериментах с биологическими клетками. На определение вектора смещения кончика зонда нацелены исследования нанодоменов электрической поляризации методом силовой микроскопии пьезоотклика.

Благодарности

Авторы благодарят М. М. Халисова за помощь в подготовке работы.

Финансирование работы

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда, грант № 19–13–00151. Точное решение задачи поиска минимума ошибок, представленное в Математическом приложении к статье, получено А.М. Минарским, СПбАУ РАН им. Ж.И. Алфёрова, в рамках государственного задания 0791-2020-0009 Министерства науки и высшего образования РФ.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Приложение

3. Математическое приложение

3.1. Постановка задачи

Запишем общее выражение для профиля угла изгиба консоли кантилевера $\alpha(x)$, под действием приложенной к острию зонда кантилевера и лежащей в плоскости YZ силы $\mathbf{F}_{YZ} = (F_Y, F_Z)$, вызывающим смещение острия недеформируемого зонда „идеального кантилевера“ в этой плоскости вдоль вектора $\mathbf{r}_{YZ}^C = (Y^C, Z^C)$:

$$y = \alpha(x) = \frac{6(\lambda F_Y + F_Z)x - 3F_Z x^2}{2k_C l_C} = \frac{(6\lambda Z^C - 2Y^C)x - (6\lambda Z^C - 3Y^C)x^2}{l_T} = ax - bx^2. \quad (\text{П1})$$

Использованы: $\lambda = l_T/l_C$ — отношение высоты зонда l_T к длине консоли l_C , коэффициент изгибной жесткости консоли k_C , нормированная координата $x = Y/l_C$ фокуса лазера схемы ОР на консоли, $x \in [0; 1]$.

Коэффициенты a и b в (П1) однозначно определяются по измеренным y_1 и y_2 в двух разных точках консоли, x_1 и x_2 :

$$\begin{cases} y_1 = ax_1 - bx_1^2 \\ y_2 = ax_2 - bx_2^2 \end{cases} \rightarrow \begin{cases} a = \frac{1}{(x_2 - x_1)} \left(x_2 \frac{y_1}{x_1} - x_1 \frac{y_2}{x_2} \right), \\ b = \frac{1}{(x_2 - x_1)} \left(\frac{y_1}{x_1} - \frac{y_2}{x_2} \right). \end{cases} \quad (\text{П2})$$

Пусть ошибки измерений подчиняются в среднем следующим соотношениям:

$$\begin{aligned} \langle (\Delta x_1)^2 \rangle &= \langle (\Delta x_2)^2 \rangle = \sigma_x^2, \quad \langle (\Delta y_1)^2 \rangle = \langle (\Delta y_2)^2 \rangle = \sigma_y^2, \\ \langle \Delta x_1 \Delta x_2 \rangle &= \langle \Delta y_1 \Delta y_2 \rangle = \langle \Delta y_1 \Delta x_1 \rangle = \langle \Delta y_1 \Delta x_2 \rangle \\ &= \langle \Delta x_1 \Delta y_2 \rangle = \langle \Delta x_2 \Delta y_2 \rangle = 0. \end{aligned} \quad (\text{П3})$$

Сформулируем задачу. Для заданных дисперсий σ_x^2 и σ_y^2 требуется найти $x_1, x_2 \in [0; 1]$, обеспечивающие минимальные дисперсии σ_a^2 и σ_b^2 :

$$\begin{cases} \sigma_a^2 = \left[\left(\frac{\partial a}{\partial x_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial a}{\partial x_2} \right)^2 \right] \sigma_x^2 + \left[\left(\frac{\partial a}{\partial y_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial a}{\partial y_2} \right)^2 \right] \sigma_y^2, \\ \sigma_b^2 = \left[\left(\frac{\partial b}{\partial x_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial b}{\partial x_2} \right)^2 \right] \sigma_x^2 + \left[\left(\frac{\partial b}{\partial y_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial b}{\partial y_2} \right)^2 \right] \sigma_y^2. \end{cases} \quad (\text{П4})$$

Для общности будем минимизировать линейную комбинацию дисперсий

$$M = \cos^2 \theta \sigma_a^2 + \sin^2 \theta \sigma_b^2 = m_x^2 \sigma_x^2 + m_y^2 \sigma_y^2. \quad (\text{П5})$$

Выражения для m_x^2, m_y^2 следуют из (П4). Параметр θ условный, вспомогательный, в зависимости от выбора его величины значимы: только σ_a^2 , $\cos \theta = 1$; только σ_b^2 , $\sin \theta = 1$; обе ошибки, $\cos \theta = \sin \theta$.

3.2. Случай $\sigma_x \ll \sigma_y$

Рассмотрим m_y^2 , квадрат чувствительности к ошибке по y

$$m_y^2 \sigma_y^2 = \cos^2 \theta \sigma_a^2 + \sin^2 \theta \sigma_b^2. \quad (\text{П6а})$$

С учетом (П2), (П4),

$$(\partial a / \partial y_1)^2 + (\partial a / \partial y_2)^2 = (x_1^4 + x_2^4) / (x_1^2 x_2^2 (x_2 - x_1)^2)$$

и

$$(\partial b / \partial y_1)^2 + (\partial b / \partial y_2)^2 = (x_1^2 + x_2^2) / (x_1^2 x_2^2 (x_2 - x_1)^2)$$

получаем

$$m_y^2 = \frac{\cos^2 \theta (x_1^4 + x_2^4) + \sin^2 \theta (x_1^2 + x_2^2)}{x_1^2 x_2^2 (x_2 - x_1)^2}. \quad (\text{П6б})$$

Чтобы исследовать на экстремум, введем новые переменные $2d = x_2 - x_1$ и $p^2 = x_1x_2$, и перепишем (П6б):

$$m_y^2 = \cos^2 \theta \left(\frac{4d^2}{p^4} + \frac{4}{p^2} + \frac{1}{2d^2} \right) + \sin^2 \theta \left(\frac{1}{p^4} + \frac{1}{p^2d^2} \right). \quad (\text{П6с})$$

Если $d \neq 0$, то $\partial(m_y^2)/\partial p < 0$. Следовательно, для любого фиксированного d , m_y^2 убывает с ростом p . Поэтому для каждого $x_2 \in [2d; 1]$, минимум m_y^2 достигается при наибольшем возможном $p^2 = (x_2 - 2d)x_2$, т.е. в точке $x_2 = x_{2(extr)} = 1$. С учетом этого (П6б) записывается как функция одной переменной $x_1 = x$:

$$m_y^2 = \frac{1 + x^2 \sin^2 \theta + x^4 \cos^2 \theta}{x^2(1 - x)^2}. \quad (\text{П6д})$$

Найдем еще одну координату экстремума

$$\frac{\partial(m_y^2)}{\partial x} = 0 \rightarrow x^4 \cos^2 \theta + x^3 \sin^2 \theta + 2x - 1 = 0. \quad (\text{П7})$$

Корень уравнения (П7) слабо зависит от θ : $x_{1(extr)} \in [0.453; 0.475]$, $x_{1(extr)} \cong 0.464$.

Таким образом, если существенна только ошибка измерений угла изгиба консоли, то наиболее точное определение вектора приложенной силы обеспечивается измерениями в точках $x_{2(extr)} = 1$ и $x_{1(extr)} \cong 0.464$.

3.3. Случай $\sigma_y \ll \sigma_x$

Рассмотрим m_x^2 , квадрат чувствительности к ошибке по x

$$m_x^2 \sigma_x^2 = \cos^2 \theta m_{ax}^2 \sigma_x^2 + \sin^2 \theta m_{bx}^2 \sigma_x^2. \quad (\text{П8а})$$

Используя (П2), (П4) и (П8а), с учетом

$$m_{ax}^2 = \left(\frac{\partial a}{\partial x_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial a}{\partial x_2} \right)^2 = \frac{x_1^4(2bx_2 - a)^2 + x_2^4(2bx_1 - a)^2}{x_1^2x_2^2(x_2 - x_1)^2}, \quad (\text{П8б})$$

$$m_{bx}^2 = \left(\frac{\partial b}{\partial x_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial b}{\partial x_2} \right)^2 = \frac{x_1^2(2bx_2 - a)^2 + x_2^2(2bx_1 - a)^2}{x_1^2x_2^2(x_2 - x_1)^2}, \quad (\text{П8с})$$

получаем

$$m_x^2 = \frac{(\cos^2 \theta x_1^4 + \sin^2 \theta x_2^2)(2bx_2 - a)^2 + (\cos^2 \theta x_2^4 + \sin^2 \theta x_1^2)(2bx_1 - a)^2}{x_1^2x_2^2(x_2 - x_1)^2}. \quad (\text{П8д})$$

Ведем новые переменные u и v :

$$\begin{cases} x_1 = \frac{a}{2b} \frac{1}{u} = vx_2, \\ x_2 = \frac{a}{2b} \frac{1}{uv}. \end{cases} \quad (\text{П9})$$

Считая $0 \leq x_1 \leq x_2 \leq 1$, имеем $0 \leq v \leq 1$ и $u \geq a/(2bv)$. При подстановке (П9) в (П8д) получаем, учитывая (П8а):

$$m_{ax}^2 = 4b^2 \left[\frac{1 + v^4}{(1 - v)^2} (u - u_1)^2 + \frac{v^2}{1 + v^4} \right], \quad u_1 = \frac{1 + v^3}{1 + v^4}, \quad (\text{П10})$$

$$m_{bx}^2 = \frac{16b^2}{a^2} \left[\frac{v^2(1 + v^2)}{(1 - v)^2} (u - u_2)^2 u^2 + \frac{v^2}{1 + v^4} u^2 \right], \quad u_2 = \frac{1 + v}{1 + v^2}. \quad (\text{П11})$$

Из (П10) и (П11) и $0 \leq v \leq 1$ также получаем

$$u_2(v) - u_1(v) = \frac{(1 - v)(1 - v^2)v}{(1 + v^2)(1 + v^4)} \geq 0. \quad (\text{П12})$$

Можно видеть, что $\partial(m_{ax}^2)/\partial u \geq 0$ и $\partial(m_{bx}^2)/\partial u \geq 0$ пока $u \geq u_2(v) \geq u_1(v)$. Действительно, в квадратных скобках (П10) стоит выражение для параболы, растущей при $u \geq u_1(v)$. В квадратных скобках (П11) заключено более сложное выражение. Но, так как с увеличением u его левое слагаемое растет при $u \geq u_2(v)$, а правое всегда растет, то при $u \geq u_2(v)$ растет и их сумма.

Как следствие, если

$$u_2(v) \geq \frac{a}{2b} \frac{1}{v}, \quad \text{что эквивалентно } \frac{v + v^2}{1 + v^2} \leq \frac{a}{2b}, \quad (\text{П13})$$

то m_{ax}^2 и m_{bx}^2 минимальны на кривой $u = a/(2bv)$, т.е. $x_2 = x_{2(extr)} = 1$ (см. (П9)). Поскольку $v \in [0; 1]$, (П13) выполняется всегда, когда $a \geq 2b > 0$.

Пусть теперь $0 < a < 2b$ и рассмотрим сначала случай $m_x^2 = m_{ax}^2$ ($\theta = 0$).

Для каждого $v = \text{const}$ из области II на рис. 4, $v_1 \leq v \leq 1$, выражение (П10) минимально в точке кривой $u = u_1(v)$. На этой кривой $m_{ax}^2 = 4b^2v^2/(1 + v^4)$ зависит только от v и минимален в точке пересечения с гиперболой $u = a/(2bv)$. Значение $v = v_1$ находится как корень уравнения $u_1(v) = a/(2bv)$, или

$$\frac{v + v^4}{1 + v^4} = \frac{a}{2b}. \quad (\text{П14})$$

В области I на рис. 4, $0 \leq v \leq v_1$, для каждого $v = \text{const}$ минимум m_{ax}^2 достигается сразу же на гиперболе.

В итоге, для всех допустимых значений u и v , m_{ax}^2 минимален на этой гиперболе (см. также подпись к рис. 4 и соотношения (П9)), т.е. на границе, соответствующей $x_2 = x_{2(extr)} = 1$.

Итак, если $m_x^2 = m_{ax}^2$, то минимум квадрата чувствительности по x лежит в области $x_1 \leq v_1$, $x_2 = 1$. Подставляя в (П10) $x_1 = v$ и $x_2 = 1$, получаем, что другая координата минимума m_{ax}^2 , $x_1 = x_{1(extr)}$, находится из минимизации по v выражения

$$m_{ax}^2 = \frac{1}{v^2(1 - v)^2} [v^4(2b - a)^2 + (2bv - a)^2]. \quad (\text{П15})$$

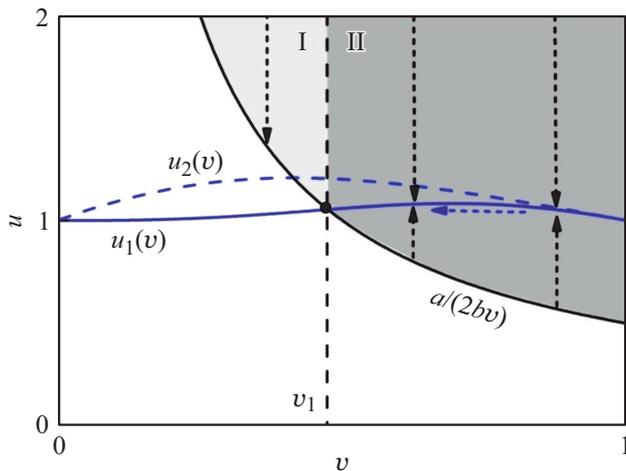


Рис. 4. Поиск минимума m_{ax}^2 , (П9). Гипербола $u = a/(2bv)$, сплошная черная кривая, соответствующая $x_2 = 1$, ограничивает снизу области I и II допустимых значений u . Для каждого $v = \text{const}$ вертикальные, пунктирные стрелки указывают направление изменений переменной u , уменьшающих m_{ax}^2 . В области I, $0 \leq v < v_1$, m_{ax}^2 достигает минимума на гиперболе. Для каждого $v = \text{const}$ в области II, $v_1 \leq v \leq 1$, m_{ax}^2 наименьший в соответствующей точке на сплошной кривой $u = u_1(v)$. В свою очередь, вдоль этой кривой m_{ax}^2 убывает с падением v , см. пунктирную стрелку под ней, и достигает минимума в точке пересечения с гиперболой, $v = v_1$.

Или, дифференцируя (П15), из корня уравнения

$$P_a(v) = (2b - a)^2 v^4 + 4b^2 v^3 - 6abv^2 + (2ab + 2a^2)v - a^2 = 0. \quad (\text{П16})$$

$$P_a(0) = -a^2 < 0, \quad P_a(a/2b) = (a(2b - a)/2b)^2 > 0$$

и

$$P_a(1) = 2(2b - a)^2 > 0,$$

и корни всегда существуют. Они зависят от a/b , и следует выбирать минимальный корень, который для $0 < a < 2b$ будет меньше v_1 , определяемого уравнением (П14). Добавим также, что $x_1 \leq v_1 < a/2b$, если $a/2b < 1$.

Перейдем к случаю $m_x^2 = m_{bx}^2$ ($\theta = \pi/2$).

Запишем (П11) по-другому:

$$m_{bx}^2 = \frac{16b^2}{a^2} [c(u - u_2)^2 u^2 + du^2],$$

$$u_2 = \frac{1+v}{1+v^2}, \quad c = \frac{v^2(1+v^2)}{(1-v)^2}, \quad d = \frac{v^2}{1+v^4}. \quad (\text{П17})$$

Дифференцируя (П17) по u , получим условия для экстремумов m_{bx}^2 :

$$(2cu^2 - 3cu_2u + cu_2^2 + d)u = 0. \quad (\text{П18})$$

Три корня (П18) несложно вычислить:

$$u = 0, \quad u_{\pm} = \frac{3u_2}{4} \pm \sqrt{\left(\frac{u_2}{4}\right)^2 - \frac{d}{2c}} = \frac{3(1+v) \pm \sqrt{(1+v)^2 - 8(1-v)^2}}{4(1+v^2)}. \quad (\text{П19})$$

На рис. 5 анализируется, где достигается минимум m_{bx}^2 . В двух частных случаях на рис. 5, m_{bx}^2 минимален в области I на гиперболах $u = 0.16/v$ и соответственно $u = 0.62/v$. Для каждого $v = \text{const}$ в области II на обоих рисунках, m_{bx}^2 наименьший на кривой $u = u_+$.

Докажем, что на кривой $u = u_+$:

$$\frac{d(m_{bx}^2)}{dv} > 0. \quad (\text{П20})$$

Если это верно, то на этой кривой значения m_{bx}^2 наименьшие: в точке ветвления v_2 , где $u_- = u_+$ (рис. 5, a), в точке v_3 , пересечения с кривой $u = u_+ = 0.62/v$ (рис. 5, b). В первом случае m_{bx}^2 продолжает убывать при движении вниз вдоль стрелки из точки ветвления в точку пересечения вертикальной линии $v = v_2$ с кривой $u = 0.16/v$, где достигается минимум m_{bx}^2 и выполняется условие $x_2 = 1$. Во втором случае минимум достигается сразу на пересечении с гиперболой, что автоматически соответствует условию $x_2 = 1$.

Согласно (П18), $d(m_{bx}^2)/du|_{u=u_+} = 0$. Следовательно:

$$\begin{aligned} \frac{d(m_{bx}^2)}{dv} \Big|_{u=u_+} &= \frac{\partial(m_{bx}^2)}{\partial v} + \frac{\partial(m_{bx}^2)}{\partial u} \frac{du_+}{dv} = \frac{\partial(m_{bx}^2)}{\partial v} \\ &= u_+^2 \left[\frac{\partial c}{\partial v} (u_2 - u_+)^2 + 2c(u_2 - u_+) \frac{\partial u_2}{\partial v} + \frac{\partial d}{\partial v} \right]. \end{aligned} \quad (\text{П21})$$

Для (П19)

$$\begin{aligned} u_2 - u_+ &= u_2/4 - \sqrt{(u_2/4)^2 - d/2c} \\ &= (d/2c) / (u_2/4 + \sqrt{(u_2/4)^2 - d/2c}). \end{aligned}$$

Пусть

$$\varepsilon u_2/2 = u_2/4 + \sqrt{(u_2/4)^2 - d/2c}, \quad 1/2 \leq \varepsilon < 1.$$

Тогда

$$(1 - \varepsilon)u_2/2 = u_2/4 - \sqrt{(u_2/4)^2 - d/2c}.$$

Следовательно,

$$\varepsilon(1 - \varepsilon)(u_2/2)^2 = d/2c.$$

Или с учетом (П17):

$$\varepsilon(1 - \varepsilon) = \frac{2d}{cu_2^2} = \frac{2(1-v)^2}{(1+v)^2}, \quad (\text{П22})$$

$$u_2 - u_+ = \frac{d}{\varepsilon cu_2}. \quad (\text{П23})$$

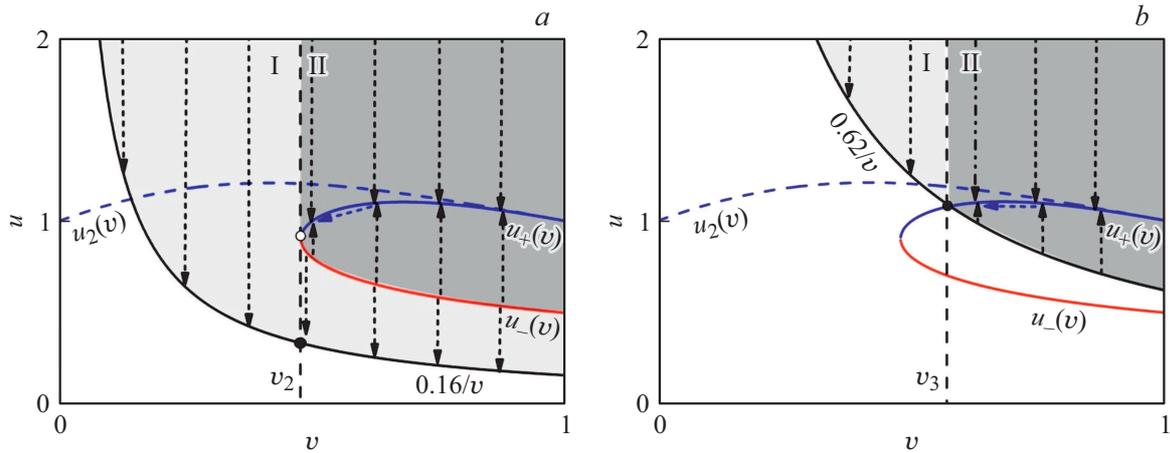


Рис. 5. Поиск минимума m_{bx}^2 . Два частных случая. *a* — гипербола, ограничивающая снизу область допустимых значений u , не пересекается с кривыми $u_+(v)$ и $u_-(v)$. *b* — гипербола пересекается с кривой $u_+(v)$. См. также пояснения и подпись к рис. 4.

Подставляя (П22) и (П23) в (П21), получаем

$$\begin{aligned} \frac{\partial(m_{bx}^2)}{\partial v} &= u_+^2 \left[\left(\frac{d}{\varepsilon c u_2} \right)^2 \frac{\partial c}{\partial v} + \frac{2d}{\varepsilon u_2} \frac{\partial u_2}{\partial v} + \frac{\partial d}{\partial v} \right] \\ &= \frac{u_+^2 d}{\varepsilon} \left[(1 - \varepsilon) \frac{\partial \ln(c)}{\partial v} + \varepsilon \frac{\partial \ln(d)}{\partial v} + 2 \frac{\partial \ln(u_2)}{\partial v} \right]. \end{aligned} \tag{П24}$$

С учетом (П17)

$$\begin{aligned} \frac{\varepsilon}{u_+^2 d} \frac{\partial(m_{bx}^2)}{\partial v} &= (1 - \varepsilon) \left[\frac{1}{1 - v} + \frac{1}{v} + \frac{v}{1 + v^2} \right] \\ &+ \varepsilon \left[\frac{2}{v} + \frac{2v}{1 + v^2} \right] + \frac{2}{1 + v} - \frac{4v}{1 + v^2} \\ &= \frac{1 - \varepsilon}{1 - v} + \frac{1 + \varepsilon}{v} + \frac{2}{1 + v} - \frac{(3 - \varepsilon)v}{1 + v^2} \\ &\geq \frac{1 + \varepsilon}{v} + \frac{2}{1 + v} - \frac{2v}{1 + v^2} \geq \frac{1 + \varepsilon}{v} > 0. \end{aligned}$$

Итак: доказано, что $d(m_{bx}^2)/dv > 0$ на кривой $u = u_+$ и, в частности, убывание m_{bx}^2 при движении в направлении стрелок под этой кривой, показанных на рис. 5.

Таким образом, m_{bx}^2 достигает минимума при условии, что $x_1 = v$ и $x_2 = 1$. Подставляя условие в (П8b), получаем

$$m_{bx}^2 = \frac{(2b - a)^2}{(1 - v)^2} + \frac{(2bv - a)^2}{v^2(1 - v)^2}. \tag{П25}$$

Минимум (П25) находится из следующего уравнения:

$$\begin{aligned} P_b(v) &= ((2b - a)^2 + 4b^2)v^3 - 6abv^2 \\ &+ (2ab + 2a^2)v - a^2 = 0. \end{aligned} \tag{П26}$$

$$P_b(0) = -a^2 < 0 \text{ и } P_b(1) = 2(2b - a)^2 > 0,$$

поэтому уравнение (П26), как и (П16), имеет один корень на интервале $0 \leq v \leq 1$.

Если $b \ll a$ ($\bar{\alpha} \rightarrow \pi n$, $F_Z \rightarrow 0$ (рис. 2, a); $\underline{\alpha} \rightarrow \arctg(1/2\lambda) + \pi n$, $Y^C \rightarrow 2\lambda Z^C$ (рис. 2, b)), уравнения (П16) и (П26) переходят в

$$\begin{cases} P_a(v) \rightarrow v^4 + 2v - 1 = 0, \\ P_b(v) \rightarrow v^3 + 2v - 1 = 0. \end{cases} \tag{П27}$$

Отметим, что в этом пределе m_x^2 и m_y^2 минимизируются в одной и той же точке.

Если $a \ll b$ ($\bar{\alpha} \rightarrow -\arctg \lambda + \pi n$, $\lambda F_Y \rightarrow -F_Z$ (рис. 2, a); $\underline{\alpha} \rightarrow \arctg(1/3\lambda) + \pi n$, $Y^C \rightarrow 3\lambda Z^C$ (рис. 2, b)), уравнения (П16) и (П26) переходят в

$$\begin{cases} P_a(v) \rightarrow v = 0, \\ P_b(v) \rightarrow v = 0. \end{cases} \tag{П28}$$

Для произвольных значений a и b уравнения для минимизации m_{ax}^2 и m_{bx}^2 сводятся к

$$\begin{cases} p_a(v) = \frac{P_a(v)}{4b^2} = (1 - \delta)^2 v^4 + v^3 - 3\delta v^2 \\ \quad + \delta(1 + 2\delta)v - \delta^2 = 0, \\ p_b(v) = \frac{P_b(v)}{4b^2} = ((1 - \delta)^2 + 1)v^3 - 3\delta v^2 \\ \quad + \delta(1 + 2\delta)v - \delta^2 = 0, \end{cases} \tag{П29}$$

где $\delta = a/2b$, $x_1 = v$.

Для минимизации $m_x^2 = \cos^2 \theta m_{ax}^2 + \sin^2 \theta m_{bx}^2$ нужно искать корень уравнения

$$\cos^2 \theta p_a(v) + \sin^2 \theta p_b(v) = 0. \tag{П30}$$

Выпишем также разложение решения (П29) по параметру $\delta = a/2b$:

$$\begin{cases} p_a(v) = 0, & v = \delta - \delta^3 + \delta^4, \\ p_b(v) = 0, & v = \delta - \delta^2 + 4\delta^3 - 18\delta^4. \end{cases} \tag{П31}$$

Минимизация относительных ошибок.

Минимизируем $(\sigma_a/a)^2 + (\sigma_b/b)^2 = \eta_x^2 \sigma_x^2$, где $\eta_x^2 = m_{ax}^2/a^2 + m_{bx}^2/b^2$. С учетом $x = v$ и $\delta = a/2b$, запишем условие минимума относительной ошибки η_x :

$$\frac{p_a(v)}{a^2} + \frac{p_b(v)}{b^2} = 0. \quad (\text{П32})$$

Или

$$(1 - \delta)^2 v^4 + (1 + 8\delta - 8\delta^2 + 4\delta^3)v^3 - 3(1 + 4\delta)v^2 + \delta(1 + 2\delta)(1 + 4\delta)v - \delta^2(1 + 4\delta) = 0. \quad (\text{П33})$$

Величины a и b разных знаков.

Изложенный выше формальный ход доказательств применим для случаев одновременно отрицательных либо одновременно положительных a и b . Рассмотрим ситуацию разных знаков a и b (подразумевается, что $x_1, x_2 \in [0; 1]$).

Подстановка $x_1 = vx_2 = |a/2b|/u$, уточняющая (П9), дает вместо (П10), (П11) и (П17) выражения, отличающиеся только заменой знака при u_1 и u_2 :

$$m_{ax}^2 \sim c_1(u + u_1)^2 + d_1, \quad (\text{П34})$$

$$m_{bx}^2 \sim (c_2(u + u_2)^2 + d_2)u^2, \quad (\text{П35})$$

с теми же зависимостями от v для c_1, c_2, d_1, d_2, u_1 и u_2 , что и в (П10) и (П17). Выражения (П34) и (П35), как функции u , всегда убывают в области положительных u . Следовательно, при минимизации m_x^2 всегда достигается и ситуация $u = |a/2b|/v$, т.е. $x_{2(extr)} = 1$. Поэтому из (П34) и (П35), как функций $x_1 = v$, после дифференцирования получатся те же уравнения, что (П16) и (П26), позволяющие найти искомые корни v на отрезке $[0; 1]$. Соотношения (П29) и (П33) также выполняются (только теперь $\delta \leq 0$). Предельные соотношения (П27) и (П28) соблюдаются, а разложение (П31) не актуально, так как в рассматриваемом случае соответствует отрицательному $x_1 = v$. Положительные значения $x_1 = v$ даются следующими разложениями по δ ($\delta < 0, |\delta| \ll 1$):

$$\begin{cases} p_a(v) = 0: & v \cong \sqrt{|\delta|} - |\delta|, \\ p_b(v) = 0: & v \cong \sqrt{\frac{|\delta|}{2}} - \frac{|\delta|}{2\sqrt{2}}. \end{cases} \quad (\text{П36})$$

Случай $a = 2b$ ($\bar{\alpha} \rightarrow \pi(2n + 1)/2, F_Y = 0$ (рис. 2, а); $\alpha \rightarrow \text{arctg}(2/3\lambda) + \pi n, 2Y^C \rightarrow 3\lambda Z^C$ (рис. 2, б)).

Подставив $\delta = 1$ в (П29), получим: $p_a(v) = p_b(v) = (1 - v)^3$, т.е. $x_1 = x_2 = 1$. В том, что такое условие соответствует минимуму m_{ax}^2 и m_{bx}^2 , можно убедиться, подставив в (П10) и (П11) связь $u = 1/v$, следующую из (П9) для $x_2 = 1$ и $a = 2b$. Тогда получим выражения

$$\begin{cases} m_{ax}^2 = \frac{a^2}{v^2}, \\ m_{bx}^2 = \frac{2a^2}{1 + v^2}, \end{cases} \quad (\text{П37})$$

которые, действительно, имеют минимум при $v = 1$, т.е. $x_1 = x_2 = 1$.

Этот результат означает, что точный оптимум по x_1 и x_2 нельзя найти без учета вклада m_y^2 .

3.4. Общий случай

Рассмотрим общий случай и, см. также (П5), минимизируем

$$m_x^2 \sigma_x^2 + m_y^2 \sigma_y^2, \quad (\text{П38})$$

где m_x^2 берется из (П8а), (П8б) и (П8с), m_y^2 из (П6б) и произведена подстановка $x_1 = v$ и $x_2 = 1$. Если установить связь

$$\sigma_y = k\sigma_x, \quad k > 0, \quad (\text{П39})$$

то придется минимизировать по v следующее выражение:

$$\frac{(\cos^2 \theta v^2 + \sin^2 \theta)(k^2 + (2b - a)^2)v^2 + (2bv - a)^2 + k^2}{v^2(1 - v)^2}. \quad (\text{П40})$$

Вклады m_y^2 и m_x^2 преобладают в зависимости от соотношения между k и $|2b - a|$. Соответственно условия минимума близки либо к $x_{1(extr)} \cong 0.464$ (большие k), либо (малые k) к корням уравнений (П16) или (П26).

Минимум (П40), $x_1 = v$, находится в области $0 < v < 1$ как корень уравнения

$$P = \cos^2 \theta [k^2(v^4 + 2v - 1) + P_a(v)] + \sin^2 \theta [k^2(v^3 + 2v - 1) + P_b(v)] = 0, \quad (\text{П41})$$

где $P_a(v)$ и $P_b(v)$ берутся из (П16) и (П26).

Когда $a = 2b$, то $P_a(v) = P_b(v) = 4b^2(1 - v)^3 = a^2(1 - v)^3$, и (П41) сводится к

$$\begin{cases} \cos \theta = 1, \min(m_a^2): k^2(v^4 + 2v - 1) + a^2(1 - v)^3 = 0, \\ \sin \theta = 1, \min(m_b^2): k^2(v^3 + 2v - 1) + a^2(1 - v)^3 = 0. \end{cases} \quad (\text{П42})$$

Корни (П42) зависят только от k/a ($\delta = 1$).

Случай $\delta = 1$ и произвольного θ описывается уравнением

$$k^2(\cos^2 \theta v^4 + \sin^2 \theta v^3 + 2v - 1) + a^2(1 - v)^3 = 0, \quad (\text{П43})$$

корни которого слабо зависят от θ .

Наиболее общим из уравнений (П41)–(П43) является (П41), его корень зависит от $\delta = a/2b, k/a$ и θ .

Условие равных относительных чувствительностей, см. (П32), означает

$$\cos^2 \theta = \frac{b^2}{a^2 + b^2}, \quad \sin^2 \theta = \frac{a^2}{a^2 + b^2}. \quad (\text{П44})$$

(П44) можно прямо использовать в (П41), решение будет зависеть от $a/2b$ и k/a .

В частности, для $a = 2b$ (П44) переходит в $\cos^2 \theta = 1/5$ и $\sin^2 \theta = 4/5$. Подстановка этого в (П32) для $k/a, k/b \ll 1$ дает

$$x_1 = v \cong 1 - \sqrt[3]{2k^2/a^2} = 1 - \sqrt[3]{k^2/2b^2}. \quad (\text{П45})$$

Для $k = a = 2b$, (П42) имеет следующие приближенные корни

$$\begin{cases} \min(m_a^2): & x_1 \cong 0.52, \\ \min(m_b^2): & x_1 \cong 0.50. \end{cases} \quad (\text{П46})$$

В заключение приведем выражения для P в (П41) в общем случае и в частных случаях, когда $a \ll b$ либо $b \ll a$:

$$P = \cos^2 \theta (k^2 + (2b - a)^2) v^4 + (\sin^2 \theta (k^2 + (2b - a)^2) + 4b^2) v^3 - 6abv^2 + 2(k^2 + ab + a^2)v - (k^2 + a^2), \quad (\text{П47a})$$

$$\frac{P|_{b \ll a}}{4b^2} \rightarrow \cos^2 \theta \left[\frac{k^2}{4b^2} (v^4 + 2v - 1) + v^4 + v^3 \right] + \sin^2 \theta \left[\frac{k^2}{4b^2} (v^3 + 2v - 1) + 2v^3 \right], \quad (\text{П47b})$$

$$\frac{P|_{b \ll a}}{(k^2 + a^2)} \rightarrow (\cos^2 \theta v + \sin^2 \theta) v^3 + 2v - 1. \quad (\text{П47c})$$

Для $k/b \gg 1$ корень (П47b) $v = x_{1(\text{extr})} \cong 0.464$, если $k/b \ll 1$, то $v \cong 0$. Корень (П47c) не зависит от k/a и всегда близок к $v = x_{1(\text{extr})} \cong 0.464$.

3.5. Расчет вспомогательного параметра θ

Значения вспомогательного параметра θ находятся с помощью (2), минимизируя $\sigma_{F_Y}^2 + \sigma_{F_Z}^2$ или $\sigma_{Y^C}^2 + \sigma_{Z^C}^2$, с учетом взаимной независимости ошибок определения a и b . Для примененного в эксперименте кантилевера с $\lambda = 0.2$ приведем выкладки расчета $\bar{\theta}$:

$$\begin{cases} F_Y = \frac{k_C l_C}{3\lambda} (\bar{a} - 2\bar{b}), \\ F_Z = \frac{2k_C l_C}{3} \bar{b} \end{cases} \rightarrow \begin{cases} \sigma_{F_Y}^2 = \frac{k_C^2 l_C^2}{9\lambda^2} (\sigma_{\bar{a}}^2 + 4\sigma_{\bar{b}}^2), \\ \sigma_{F_Z}^2 = \frac{4k_C^2 l_C^2}{9} \sigma_{\bar{b}}^2 \end{cases}$$

$$\sigma_{F_Y}^2 + \sigma_{F_Z}^2 = \frac{k_C^2 l_C^2}{9\lambda^2} (\sigma_{\bar{a}}^2 + 4(1 + \lambda^2)\sigma_{\bar{b}}^2) \rightarrow \cos^2 \bar{\theta} \cong 0.19,$$

$$\sin^2 \bar{\theta} \cong 0.81; \quad (\text{П48})$$

а также $\underline{\theta}$:

$$\begin{cases} Y^C = \lambda l_C (\underline{a} - \underline{b}), \\ Z^C = \frac{l_C}{6} (3\underline{a} - 2\underline{b}) \end{cases} \rightarrow \begin{cases} \sigma_{Y^C}^2 = \lambda^2 l_C^2 (\sigma_{\underline{a}}^2 + \sigma_{\underline{b}}^2), \\ \sigma_{Z^C}^2 = \frac{l_C^2}{36} (9\sigma_{\underline{a}}^2 + 4\sigma_{\underline{b}}^2) \end{cases}$$

$$\sigma_{Y^C}^2 + \sigma_{Z^C}^2 = l_C^2 ((\lambda^2 + 1/4)\sigma_{\underline{a}}^2 + (\lambda^2 + 1/9)\sigma_{\underline{b}}^2)$$

$$\rightarrow \cos^2 \underline{\theta} \cong 0.66, \quad \sin^2 \underline{\theta} \cong 0.34. \quad (\text{П49})$$

Список литературы

- [1] G. Binnig, C.F. Quate, C. Gerber. Phys. Rev. Lett., **56** (9), 930 (1986). DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.56.930>
- [2] Bhushan B. (Ed.) *Nanotribology and Nanomechanics. An Introduction* (Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, 2005)
- [3] G. Dai, K. Hahm, F. Scholze, M.-A. Henn, H. Gross, J. Fluegge, H. Bosse. Meas. Sci. Technol., **25**, 044002 (2014). DOI: [10.1088/0957-0233/25/4/044002](https://doi.org/10.1088/0957-0233/25/4/044002)
- [4] A. Boloipion, H. Xie, D.S. Haliyo, S. Régnier. IEEE/ASME Transactions on Mechatronics **17** (1), 116 (2012). DOI: [10.1109/TMECH.2010.2090892](https://doi.org/10.1109/TMECH.2010.2090892)
- [5] И.А. Няпшаев, А.В. Анкудинов, А.В. Стовяга, Е.Ю. Трофимова, М.Ю. Еропкин. ЖТФ, **82** (10), 109 (2012).
- [6] E. Soergel. J. Phys. D. Appl. Phys., **44**, 464003 (2011). <https://doi.org/10.1088/0022-3727/44/46/464003>
- [7] S. Fujisawa, M. Ohta, T. Konishi, Ya. Sugawara, S. Morita. Rev. Sci. Instrum., **65** (3), 644 (1994). DOI: <https://doi.org/10.1063/1.1145131>
- [8] H. Kawakatsu, H. Bleuler, T. Saito, K. Hiroshi. Jpn. J. Appl. Phys., **34**Pt1 (6B), 3400 (1995). DOI: <https://doi.org/10.1143/JJAP.34.3400>
- [9] A. Labuda, R. Proksch. Appl. Phys. Lett., **106** (25), 253103 (2015). DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4922210>
- [10] Электронный ресурс. Режим доступа: <https://afm.oxinst.com/assets/uploads/products/asylum/documents/Cypher-IDS-Option-DS-March2018.pdf>
- [11] S. Alexander, L. Hellemans, O. Marti, J. Schneir, V. Elings, P.K.J. Hansma. J. Appl. Phys., **65** (1), 164 (1989). DOI: <https://doi.org/10.1063/1.342563>
- [12] D. Rugar, H.J. Mamin, P. Guethner. Appl. Phys. Lett., **55** (25), 2588 (1989). DOI: <https://doi.org/10.1063/1.101987>
- [13] R.S.M. Mrinalini, R. Sriramshankar, G.R. Jayanth. IEEE/ASME Transactions on Mechatronics, **20** (5), 2184 (2015). DOI: [10.1109/TMECH.2014.2366794](https://doi.org/10.1109/TMECH.2014.2366794)
- [14] R. Proksch, T.E. Schaffer, J.P. Cleveland, R.C. Callahan, M.B. Viani. Nanotechnology, **15** (9), 1344 (2004). DOI: [10.1088/0957-4484/15/9/039](https://doi.org/10.1088/0957-4484/15/9/039)
- [15] A.V. Ankudinov. Nanosystems: Phys., Chem., Mathemat., **10** (6), 642 (2019). DOI: [10.17586/2220-8054-2019-10-6-642-653](https://doi.org/10.17586/2220-8054-2019-10-6-642-653)
- [16] D. Sarid. *Exploring Scanning Probe Microscopy with MATHEMATICA. Second edition.* (WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2007)
- [17] M.A. Lantz, S.J. O'Shea, A.C.F. Hoole, M.E. Welland. Appl. Phys. Lett., **70** (8), 970 (1997). DOI: <https://doi.org/10.1063/1.118476>
- [18] А.В. Анкудинов, М.М. Халисов. ЖТФ, **90** (11), 1951 (2020). DOI: [10.21883/JTF.2020.11.49989.117-20](https://doi.org/10.21883/JTF.2020.11.49989.117-20)
- [19] Электронный ресурс. Режим доступа: <https://www.ntmtdt-si.ru/resources/spm-theory/theoretical-background-of-spm>
- [20] J.E. Sader, J.W.M. Chon, P. Mulvaney. Rev. Sci. Instrum., **70** (10), 3967 (1999). DOI: <https://doi.org/10.1063/1.1150021>
- [21] В.Л. Миронов. *Основы сканирующей зондовой микроскопии: учебное пособие для студентов старших курсов вузов* (Техносфера, М., 2009)