

3次元走査型力顕微鏡を用いた $\text{CaF}_2(111)$ /水界面の水和構造解析CaF₂(111)-Water Interfaces Investigated by 3D Scanning Force Microscopy金大院¹, 埼玉大², University College London³, ACT-C/JST⁴○宮澤佳甫¹, 小林成貴², Matthew Watkins³, Alexander L. Shluger³, 福間剛士^{1,4}Kanazawa Univ.¹, Saitama Univ.², University College London³, ACT-C/JST⁴, Keisuke Miyazawa¹,Naritaka Kobayashi², Matthew Watkins³, Alexander L. Shluger³ and Takeshi Fukuma^{1,4}

E-mail: miyazawa@stu.kanazawa-u.ac.jp

周波数変調原子間力顕微鏡 (FM-AFM) をベースとして開発された 3次元走査型力顕微鏡 (3D-SFM) は、液中で探針を 3次元的に走査することで、固液界面における水和構造や揺動構造などの局所的な計測が可能である[1]。我々は、 CaCO_3 や CaF_2 といった比較的シンプルな系を用いて、液中における水分子の密度分布のシミュレーションと、3D-SFM 測定において探針が受ける力の 3D-SFM 測定の結果を比較してきたが、近年、水分子密度分布 ($\rho(z)$) と、探針が液中の水分子から受ける力 ($f(z)$) の関係式が、理想探針を仮定して求められている[2]。

$$f(z) = \frac{k_B T}{\rho(z)} \frac{d\rho(z)}{dz} \quad (k_B : \text{ボルツマン定数}, T : \text{温度}) \quad (1)$$

これまで、 $\text{CaF}_2(111)$ /水界面におけるシミュレーションと実験の比較では、図 1(a)に点線で示す Ca^{2+} 上の箇所では $\rho(z)$ とフォースカーブのコントラストが一致しなかった。しかしながら、式(1)を考慮して $\rho(z)$ を $f(z)$ に変換すると、 $\rho(z)$ の値が小さな領域でも、式(1)における $1/\rho(z)$ の影響により大きな $f(z)$ の値を示す場合があること分かった。この点線で示した部分におけるコントラストは、図 1(d)に示すように、式(1)で $\rho(z)$ から変換された $f(z)$ だけではなく、FEP 法を用いたシミュレーションから求めたフォースカーブや、3D-SFM 測定で得られたフォースカーブでも再現しており、3D-SFM 測定で取得した 3次元力分布を 3次元水分子密度分布そのものに変換できる可能性があることを示している。

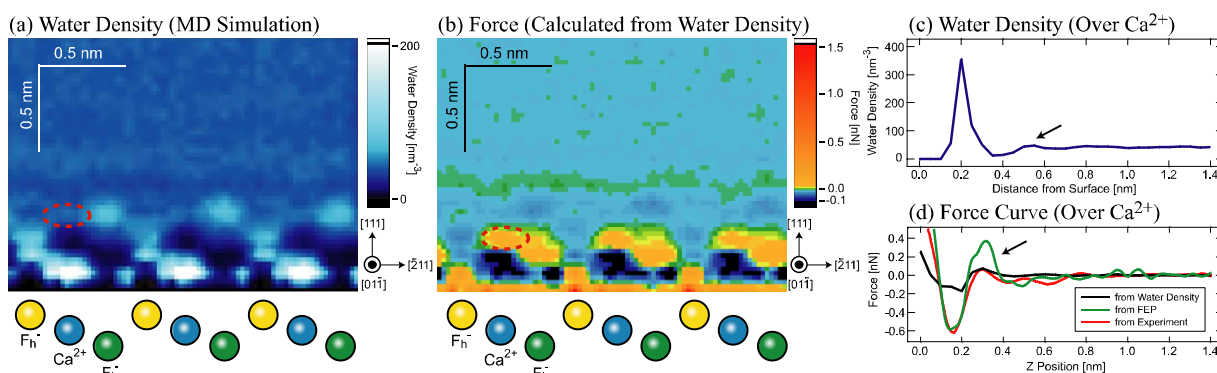


図 1: (a) $\text{CaF}_2(111)$ /水界面の水分子密度分布(MD シミュレーション)、(b) (a)の $\rho(z)$ から式(1)を用いて計算した $f(z)$ 、(c) (a)から取得した Ca^{2+} 上の $\rho(z)$ 、(d) (b)から取得した Ca^{2+} 上の $f(z)$ (黒線)、シミュレーション(FEP 法)で計算した Ca^{2+} 上のフォースカーブ (緑線)、3D-SFM 測定で取得した Ca^{2+} 上のフォースカーブ (赤線)

【参考文献】

[1] T. Fukuma, Y. Ueda, S. Yoshioka, H. Asakawa, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 016101 (2010).[2] M. Watkins, and B. Reischl, *J. Chem. Phys.* **138**, 154703 (2013).