

3D-FM-AFM および MD 計算を用いた表面構造次元と 3 次元水和構造の解明

Relationship between surface structural dimensions and hydration structures

by 3D-FM-AFM and MD calculation

○(PC) 梅田健一^{1,2}, 湊丈俊³, 小林圭¹, 山田啓文¹ (1. 京大院工, 2. 東大院新領域, 3. 京大 SACI)

°Kenichi Umeda^{1,2}, Taketoshi Minato³, Kei Kobayashi¹, Hirofumi Yamada¹

(1. Dept. of Electronic Sci. & Eng., Kyoto Univ.,

2. Dept. of Adv. Mater. Sci., Univ. of Tokyo, 3. SACI, Kyoto Univ.)

E-mail: umeda.k@afm.k.u-tokyo.ac.jp



われわれは液中動作の 3 次元周波数変調型 AFM (3D-FM-AFM) の開発に成功し、これまで表面物性と 3 次元局所水和構造との相関について議論を行ってきた。一方で、今後より複雑な高次表面構造をもった生体試料表面上で同様の水和構造計測を行い生体分子構造との相関を解明するためには、表面構造と局所水和構造との相関に関する知見が必要となる。本研究では、系統立ててこの知見を得るために、異なる表面構造次元上において形成された水和構造の比較を行うことを目的とした。

0、1、2 次元表面構造としてそれぞれケイ酸塩鉱物の一種であるアルバイト ($\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$) の(001)、(010)表面、アポフィライト ($\text{KCa}_4\text{Si}_8\text{O}_{20}\text{F}\cdot 8\text{H}_2\text{O}$) の(001) 表面を用いた。図 1 にこれらの表面上において、3D-FM-AFM 測定および分子動力学計算により得られた 3D データから再構成した 2D XY マップ像を示す。このように 0 次元構造ではドット的な原子像、1 次元構造ではチェーン的な原子像が観察された。一方で 2 次元構造においては、第 1 水和層では水分子直径と一致する小さな周期の吸着水構造が観察されたのに対し、第 2 水和層では大きな周期の水和構造が観察された。このように表面構造次元の違いが水和構造の異方性や周期に反映されることを明らかにした。

[1] 梅田ほか, 第 62 回応用物理学会春期学術講演会, 14p-D9-7 (2015).

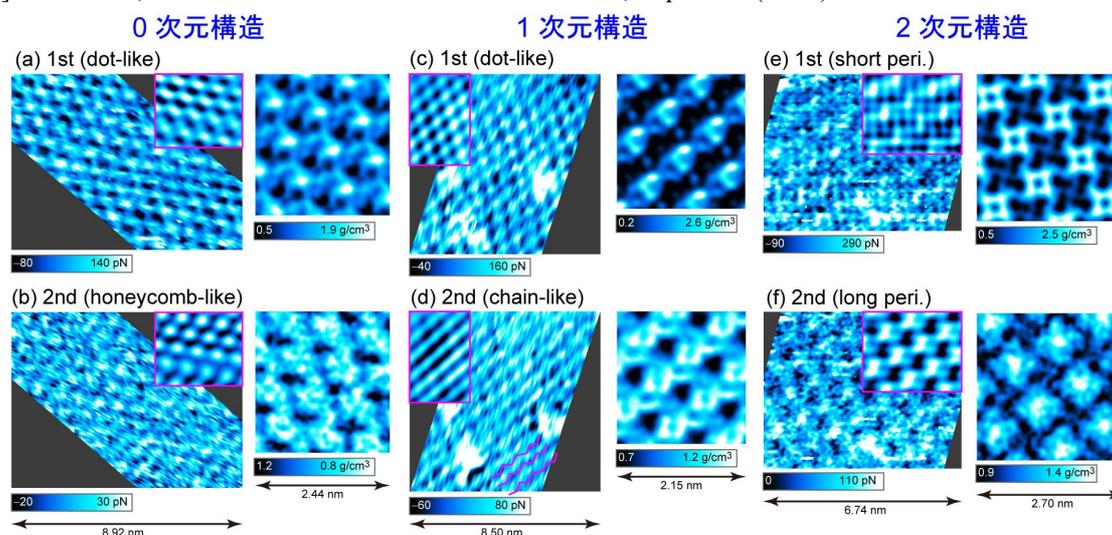


図 1 (a,b) 0 次元、(c,d) 1 次元、(e,f) 2 次元構造の XY マップ像。(a,c,e) 第 1、(b,d,f) 第 2 水和層。それぞれにおいて、左が実験結果、右が理論計算結果を示す。実験結果上の挿入図は FFT-filter 像を示す。