

カルサイト／水界面で取得した 3 次元力分布像の探針依存性

Tip dependence of three-dimensional force images measured at calcite-water interfaces

○宮澤佳甫¹、J. Tracey²、B. Reischl³、P. Spijker²、A. Foster^{1, 2}、福岡剛士^{1, 4}

(1. 金大院、2. Aalto University、3. Curtin University、4. ACT-C)

○K. Miyazawa¹、J. Tracey²、B. Reischl³、P. Spijker²、A. Foster^{1, 2}、T. Fukuma^{1, 4}

(1. Kanazawa University、2. Aalto University、3. Curtin University、4. ACT-C)

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

近年、液中周波数変調原子間力顕微鏡 (FM-AFM) 技術の発展により、固液界面におけるサブナノスケール 3 次元力分布計測が可能となった。これまでに、液中 AFM で計測した力分布と、理論的に計算した水和構造の分布が良く一致する例が示されており、液中 AFM を用いた水和構造計測の可能性が期待されている。また、最近では、AFM シミュレーション (図 1a) と実験の比較により、AFM を用いた水和構造計測の詳細なメカニズムの理解も進んできた。これらの研究により、我々はこれまでに、液中 AFM を用いてサブナノスケールの水和構造計測が可能な根拠を示してきた。

しかしながら、実際の液中 AFM 計測では、既に水和構造が明らかになっている固液界面系でも、AFM 実験毎に異なる力分布像のコントラストが得られる事が多々ある。この問題は、AFM 実験中の探針先端の変化が主な原因として考えられてきたが、探針先端の状態と力分布像のコントラストの詳細な関係性は未解明のままである。そこで本研究では、実験と理論双方で、カルサイト／水界面で複数の力分布像を取得し、探針先端の変化が力分布像に与える影響を検証した。まず、AFM 実験では、カルサイト／水界面で膨大な数の 3 次元力分布像を

取得し、その中から明瞭な原子スケールのコントラストを含む 3 次元力分布像を取得した。その結果、少なくとも 3 種類の異なるコントラストパターンを得ることができた。理論的には、シミュレーション上で 3 種類の異なる探針モデル (図 1b-d, (i)) を使って 3 次元力分布像を取得し、それによって 3 種類の異なる 3 次元力分布像のコントラストを得ることができた。

この結果を基に、シミュレーションで用いた異なる探針の直下の水和構造を詳細に解析した (図 1b-d, (ii)-(iii))。探針直下の水和構造分布を見ると、水平方向に対称なもの (図 1b(iii))、非対称なもの (図 1c(iii))、明瞭な局所水和構造が無いもの (図 1d(iii)) が存在した。そして、力分布像のコントラストの違いは、主にこれらの探針先端の直下の水和構造の形状や安定性によって決定することが分かった。本研究は、探針先端の形状や原子種を直接特定するものではないが、それらの違いにより形成される探針直下の水和構造が、3 次元力分布像の形成に大きく影響することを示している。今後、液中 AFM で取得する力分布像を詳細に解析する時や、水和構造計測に最適な探針の作製条件を最適化する時に、本研究で得られた知見が貢献すると考えられる。

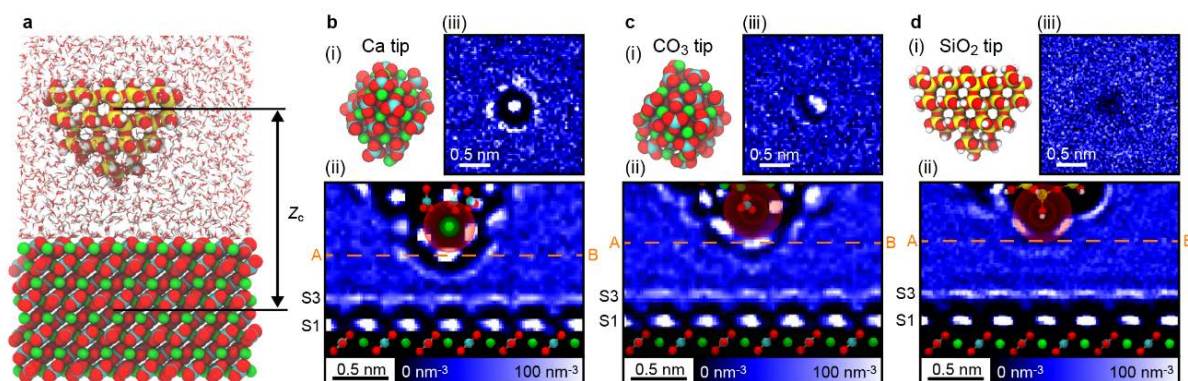


Fig. 1: (a) Model of the atomistic MD simulation. Z_c is the distance between the center of masses of the AFM tip and the calcite sample. MD simulation of AFM measurements in water using (b) calcite tip terminated by Ca, (c) calcite tip terminated by CO_3 , (d) silica tip terminated by SiOH , where (i) atomistic tip models, (ii) vertical cross sections of water density distributions and (iii) lateral cross sections taken along line A-B in (ii).