

# 試料表面に形成される溶媒和構造の逆計算

神戸大学大学院理学研究科

天野 健一

## 要旨

本研究は液中AFM（原子間力顕微鏡）やSFA（表面力測定装置）で測定される力を溶媒和構造、即ち、試料表面上の液体密度分布に変換する理論の研究である（私はこれを逆計算と呼んでいる）。これまでAFMやSFAで測定された力はやむなく溶媒和構造として捉えられてきた。しかし実際は、力は溶媒和構造ではない。さらに、プローブが試料表面近傍に存在する事によって溶媒和構造は壊れてしまうので、こういう事も考慮しつつ逆計算を行う必要がある。また、液体は連続体ではなく小さな粒子の集合体であるという事も考慮する必要がある。本研究ではこれらの難点を考慮した逆計算手法の研究を行った。測定で得られた力を溶媒和構造に変換する理論は液中AFMやSFAがつくられて以来数十年の間解く事の出来なかった難問である。しかし、本研究によってその難問を理論的に解くことが出来た。

## 1. 研究目的と成果

試料表面上に形成された溶媒和構造を実験的に測定するには現在の所、X線や中性子線散乱を利用する必要がある。しかし、それらの手法では、ガラスなどのアモルファス材料や生体試料表面上の溶媒和構造は測定できない。そこで私は、この様な表面上の溶媒和構造を測定するために液中AFM（原子間力顕微鏡）やSFA（表面力測定装置）に注目した。しかし、これらの装置はプローブと試料表面間の力しか測定できない。目標を達成するためには、測定された力を溶媒和構造（液体の密度分布）に変換する理論をつくる必要がある。本研究は、その変換理論の導出、検証計算、そして開発（改善）である。

液中AFMやSFAで測定された力を溶媒和構造に変換するには、(A)液体を連続体ではなく微小な粒子の集団としてとらえる必要がある、また(B)プローブが試料表面近傍に配置する事によって元々あった溶媒和構造が壊れる事も考慮する必要がある。これらが、変換式を導出する上での難点であり、数十年の間変換式が提案されなかった事の原因と考えられる。しかし、本研究によって、プローブが感じ取った力を液体構造に変換する理論の導出に成功した。(I)研究始めの初期は、理想探針と言って、プローブは液体と同一の粒子として近似した上で変換式を求めた。(II)次に、様々な直径と表面溶媒和特性の球状探針が感じ取った力を液体構造に変換する理論を提案した。しかし、この理論では、扱える系は一次元であり、かつ、計算負荷も高く、また経験的なパラメーターとモンテカルロシミュレーションに頼る必要があるため実用性が低い。私の判断では、理想探針の変換方法の方が実用性が高い。(III)次に私は、様々なプローブの形状と表面溶媒和特性が扱える変換理論を提案した。この理論がこれまでの変換理論の中で最も有用で洗練されたものである。私はこの理論を元に、液中AFM用とSFA用の変換理論を提案した。そして、剛体

型のSFAにおいて、理論の検証計算も行った。検証によると、本変換理論は実用的である事が判明した。ところで、この変換理論は理想探針の変換理論と異なり、プローブ周りの溶媒和構造がインプットデータとして必要とされる。そこで私は、そのインプットデータさえも必要としない手法を提案した。この手法では、プローブ周りの溶媒和構造の代わりに試料表面と液体粒子間の二体ポテンシャルをインプットデータとして利用する。この様に、私は本研究によって、液中AFMやSFAにおける理論的に大きいと考える成果を達成する事ができた。この成果は、本研究で期待された以上のものと考えられる。

## 2. まとめと今後の課題

本研究では、液中AFMやSFAで測定されるプローブが感じ取る力を元に試料表面上の溶媒和構造を求める変換理論の導出、検証計算、そしてその理論の開発（改善）を行った。これらの変換式によって、液中AFMやSFAの利用価値が高くなったと考えられる。また、ゆくゆくは液中AFMの測定精度が高くなることによって、その測定で得られた力を溶媒和構造に変換し、画像として綺麗な溶媒和構造が得られる様になると考えられる。また、アモルファス材料や生体試料表面上でも精密に溶媒和の力が測定できるようになれば、本研究の最大目標であるX線や中性子散乱で測定できない溶媒和構造の測定が出来るようになる。今後は、本変換理論のさらなる検証計算、そして実用化を行いたいと考えている。

## 研究成果（論文）

- [1]理想探針近似による変換 in a simple liquid (3D system). Ken-ichi Amano, Kazuhiro Suzuki, Takeshi Fukuma, and Hiroshi Onishi, arXiv:1212.1888 (2012).
- [2]理想探針近似による変換 in a binary and molecular liquids (3D system). Ken-ichi Amano, Kazuhiro Suzuki, Takeshi Fukuma, and Hiroshi Onishi, arXiv:1212.6138 (2012).
- [3]任意の直径と表面溶媒和特性の球状探針近似による変換 in a simple liquid (1D system). Ken-ichi Amano, arXiv:1209.0303 (2012).
- [4]様々な形状と表面溶媒和特性の探針を扱える変換 in a simple liquid (3D system). Ken-ichi Amano and Ohgi Takahashi, arXiv:1305.3967 (2013).
- [5]SFA の 条 件 下 で の 変 換 in a hard-sphere solvent (1D system). Ken-ichi Amano and Ohgi Takahashi, arXiv:1307.0942 (2013).
- [6]SFA の条件下での変換 in non-rigid system (1D system) & プローブ周りの溶媒和構造をインプットデータとして必要としない変換 (3D system). Ken-ichi Amano, arXiv:1309.3770 (2013).