

白雲母表面におけるカフェイン分子の吸着構造の解明 Adsorption Structure of Caffeine Molecules on a Muscovite Surface

佐久間博¹, 川野潤², 中尾裕則³

¹物質・材料研究機構, 〒305-0044 つくば市並木 1-1

²北海道大学, 〒060-0810 札幌市北区北 10 条西 8

³KEK 物構研放射光, 〒305-0801 つくば市大穂 1-1

Hiroshi SAKUMA^{1,*}, Jun KAWANO², and Hironori NAKAO³

¹National Institute for Materials Science, 1-1 Namiki, Tsukuba, 305-0044, Japan

²Hokkaido University, N10 W8, Kita-ku, Sapporo 060-0810, Japan

³PF, IMSS, KEK, Tsukuba 305-0801, Japan

1 はじめに

シート状の結晶構造を持つ粘土鉱物は、水中からのカフェイン分子吸着剤として利用されている。その吸着能は、粘土鉱物表面と層間に存在する陽イオン種により変化することが、我々の最近の研究から明らかとなった[1]。

本研究では、粘土鉱物の一つである白雲母の表面の陽イオン種が Na⁺である系を準備し、白雲母表面に吸着したカフェイン分子の構造を表面 X 線散乱実験から解明することを目的とする。

2 実験

昨年度まで 00L 方向の Crystal truncation rod (CTR) 散乱を測定してきた。本年度は白雲母表面と平行成分の構造解析を行うため、20L, 02L, 11L, 13L, 33L 軸方向の測定を実施した。測定は四軸回折計で実施し、X 線の波長は 11 keV、散乱光は二次元検出器で計測した。これらの測定はすべて物質構造科学研究所・放射光科学研究施設の BL-4C で実施した。

3 結果および考察

測定結果の一例として NaCl 水溶液中の 00L, 20L 軸方向の CTR 散乱測定結果をそれぞれ図 1 および図 2 に示す。

白雲母表面と平行な面内の情報を含まない 00L 軸方向の CTR 散乱プロファイル (図 1) では、L が偶数の位置でブラッグ反射を観察した。ブラッグ反射間の強度の弱い散乱では、カフェインの有無で明確な違いは見られない。この原因として二つの可能性が考えられる。一つは、白雲母表面でカフェインの吸着量が少ない可能性、もう一つは、吸着したカフェインの電子密度が、押しつけた水分子の電子密度と変わらない可能性である。

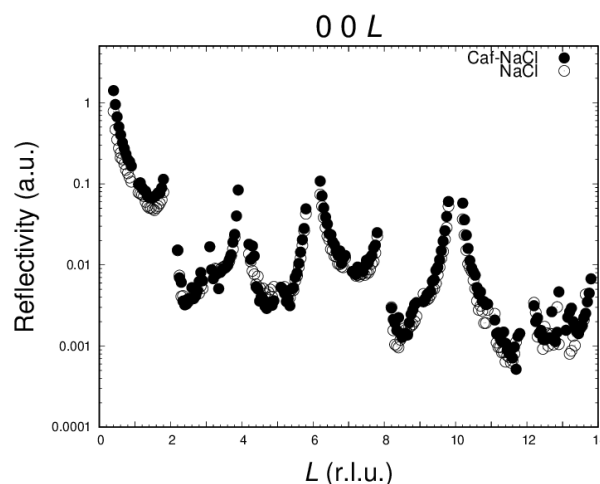


図 1 : 白雲母-NaCl 水溶液界面の 00L 軸方向の CTR 散乱。●がカフェイン有りの場合、○がカフェイン無しの場合の結果。

一方で、20L 軸方向の CTR 散乱測定結果 (図 2) では、やや $L=1, 3, 4.4$ 付近の強度にカフェインの有無で差がみられる。このことは、カフェインが白雲母表面に吸着することで、白雲母表面と平行方向の電子密度分布に変化が生じたことを示唆する。粘土鉱物/NaCl 水溶液界面における分子動力学計算の結果によれば、カフェイン分子は電氣的に中性であるが極性分子であるため、周りに陽イオンが配位しやすいことがわかる[1]。本研究の実験結果は、カフェイン分子が白雲母表面に吸着し、周りに Na イオンを静電的に配位させるため、白雲母表面の面内方向の電子密度分布に変化が生じたものと理解できる。またこの結果から 00L でカフェインの有無で散乱強度に変化がなかったことは、吸着したカフェインの電子密度と押しつけた水分子の電子密度に大きな変化がなかったことを示しているかもしれない。

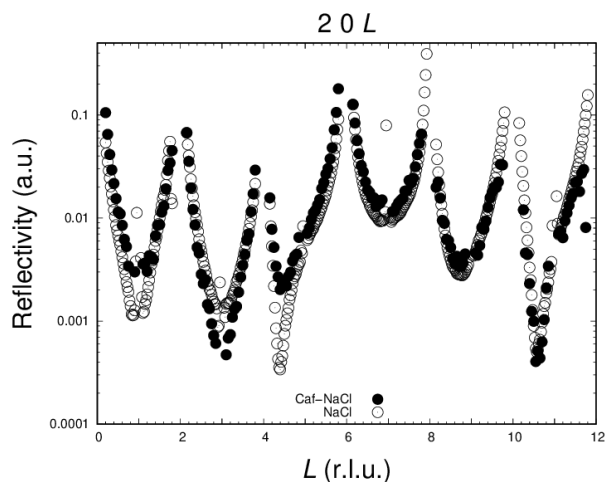


図2：白云母-NaCl水溶液界面の $20L$ 軸方向のCTR散乱。●がカフェイン有りの場合、○がカフェイン無しの場合の結果。

4 まとめ

今後は、他のロッドでのX線散乱プロファイルを総合的に解析し、界面の三次元電子密度を得るとともに、分子動力学計算等の分子シミュレーションと比較することで、カフェイン分子の白云母表面への吸着構造と吸着メカニズムを明らかにする。

参考文献

[1] H. Sakuma *et al.*, *J. Phys. Chem. C* **124**, 25369 (2020).

* SAKUMA.Hiroshi@nims.go.jp