

二層グラフェン層間に拘束された水分子クラスターの 二次元／三次元構造変化

Two- to Three-dimensional Transition of Confined Water between Freestanding Graphene Sheets

¹電通大基盤理工,²JST-CREST (M2)Agustian Rifan,¹ 赤石 暁,^{1,2} 中村 淳^{1,2}
The University of Electro-Communications,¹ CREST, Japan Science and Technology Agency²
(M2)Rifan Agustian¹, Akira Akaishi^{1,2}, Jun Nakamura^{1,2}
E-mail: rifan@natori.ee.uec.ac.jp

近年、ナノ構造の内部に拘束された水分子は様々な配列構造を示すことがわかってきた。拘束された水は、バルク水では見られない新たな形態を取る[1, 2]。例えば、透過電子顕微鏡を用いた実験で、グラフェン層間に挟まれた水分子は新たな 2 次元 Square Ice 構造を取ることが報告された[1]。古典的な分子動力学シミュレーションを用いた理論的な研究により、グラフェンシート間のファンデルワールス引力による側圧が Square Ice 形成の主要因であることが示唆されている。水が拘束された場合、温度および圧力の他に、閉じ込め形状も、拘束された水の構造を決定するのに重要な役割を果たすと考えられる。これまでグラフェン層間に拘束された水構造の評価においては、固定された 2 枚の平行なグラフェンシートを用いたシミュレーションによる議論が進んでいる。しかし、グラフェンは比較的容易にその平面を湾曲させることが知られており、グラフェンの伸縮性が水の閉じ込めに及ぼす影響を調べるのが不可欠である。

本研究では、Adaptive Intermolecular Reactive Empirical Bond Order (AIREBO) ポテンシャルを用いてグラフェンの伸縮性を考慮し、自立したグラフェンによるソフトな拘束を分子動力学シミュレーションにより評価した。室温 (300K) でグラフェン層間に拘束された概ね 100 個程度の水分子クラスターでは固相的な振る舞いが見られた。2 枚の自立したグラフェンシートに拘束された水分子クラスターは、水分子の数に依存して 2 次元から 3 次元構造に及ぶ様々な固体様構造を持つ。少量の水分子が拘束された場合には、水分子が層状の二次元形状を持つ。一方、水分子の量が増加するにつれて、水の構造は二次元の層状から Square Ice の層内構造を持つ三次元円盤形に構造変化した。グラフェンの伸縮性がグラフェンの拘束力に及ぼす影響については当日議論したい。

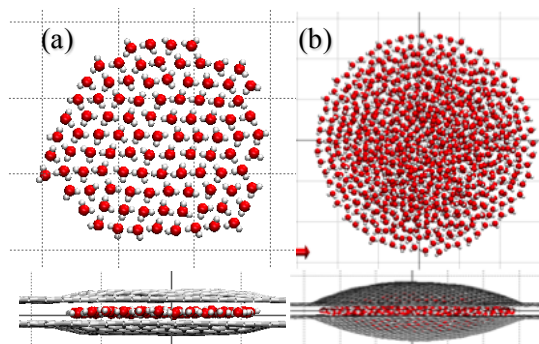


Fig. 1 Structure of confined water between graphene sheets: (a) 2D (b) 3D

- [1] A. Akaishi, T. Yonemaru, and J. Nakamura, ACS Omega **2**, 2184-2190 (2017).
[2] G. Algara-Siller, O. Lehtinen, F.C. Wang, R.R. Nair, U. Kaiser, H.A. Wu, A.K. Geim, and I.V. Grigorieva, Nature **519**, 443-445 (2015).