

h-BN 基板とグラフェンの界面に閉じ込められた水の誘電分極に関する MD 計算

Molecular Dynamics Simulations of the Dielectric Polarization Characteristics of the Water between h-BN Substrate and Graphene

東理大理¹, 東理大工², W-FST³ ○(D)木岡 夕星¹, (P)前川 侑毅², 笹岡 健二³, 山本 貴博^{1,3}

Faculty of Science, Tokyo Univ of Sci.¹, Faculty of Engineering, Tokyo Univ of Sci.², Water Frontier

Science & Technology Research Center, RIST, Tokyo Univ of Sci.³, °Yusei Kioka¹, Yuki

Maekawa², Kenji Sasaoka³, Takahiro Yamamoto^{1,3}

E-mail: takahiro@rs.tus.ac.jp

グラフェンは炭素原子の六員環構造を持つ単層の物質である。グラフェン中の電子はシリコンの 100 倍以上もの移動度を示すことや[1]、グラフェンは非常に薄い原子層材料であることから高感度なガスセンサや高速な FET などのデバイスへの応用が期待されている。

一方、グラフェンは全体が環境に曝されていることから、周囲の環境による物性への影響が大きいことが懸念される。特に近年の研究によると、大気圧雰囲気下でグラフェンの表面[2-5]やグラフェン/基板との界面[6]に水分子が凝集することが明らかとなっている。水分子は極性をもっているため、凝集した水が分極することによってグラフェンに電荷を誘起させ、電気伝導特性に影響を与えることが考えられる。したがってこのようなグラフェンの表面の薄い水の層や、基板とグラフェンの間のナノ空間に閉じ込められた水の分極特性を系統的に明らかにしなければならない。本研究の目的は基板とグラフェンの界面に存在する水の誘電特性を明らかにすることである。

まず、グラフェンの基板として表面が原子レベルで平坦な六方晶窒化ホウ素(h-BN)を用い、グラフェンと h-BN 基板の間に水分子が 1 層だけ凝集する構造を分子動力学(MD)計算から作成した。この界面の水の構造に対して、温度を変化させた時の水分子の電気双極子を解析することによってそれぞれの温度での電気感受率を算出した。これらの計算から 300K において界面の水の電気感受率は、先行研究の実験結果で示されたバルク水の電気感受率 77.36[7]と比べ、1/100 程度の非常に小さい値を示すことが明らかとなった。

- [1] Bolotin, K. I. et al. Solid State Commun. **146**, 351–355 (2008).
- [2] T. A. Ho and A. Striolo, J. Chem. Phys. **138**, 054117 (2013).
- [3] A. Akaishi, T. Yonemaru, and J. Nakamura, ACS Omega **2**, 2184 (2017).
- [4] K.Suzuki, N.Oyabu, *et al.*, Applied Physics Express **4**, 125102 (2011).
- [5] Y. Maekawa, K. Sasaoka, T. Yamamoto, Jpn. J. Appl. Phys. **57**, 035102 (2018).
- [6] M.Schrivier, *et al.*, ACS Nano **7**, 7, 5763-5768 (2013).
- [7] R. Deul, Dielektrizitätskonstante und Dichte von Wasser-Benzol-Mischungen bis 400°C und 3000 bar, Ph.D. dissertation, University of Karlsruhe, Karlsruhe, Germany (1984).