

分子動力学シミュレーションによるグラフェンに凝集した 特異な水の誘電特性の解析

Analysis of the Dielectric Properties of the Unique Water Adsorbed on the Graphene using Molecular Dynamic Simulations

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

グラフェンやカーボンナノチューブ(CNT)は疎水性の物質であることから、長らく水が吸着しないと考えられてきた。しかしながら近年の研究成果によって、大気圧雰囲気下においてグラフェンの界面[1-4]やグラフェンと基板の界面[5]、また CNT の周囲[6]に水分子が層状に凝集することが明らかとなった。この界面付近のミクロな水の層は通常バルクの水とは異なる密度をもち、グラフェンの界面での水の層[7]、CNT 周囲の水の層[6]のどちらも、バルク水よりも3倍以上大きい密度を示すことが報告されている。また、バルク水は水素結合が四面体構造をとることが知られているが、この界面の水はグラフェンに平行な面内で水素結合するような層状構造をとることが報告されている[7]。

このようにグラフェンの界面に存在する水は、バルクと比べて特異な密度や構造を示すことから、誘電特性に関しても特異性を示すことが考えられる。そこで、本研究では分子動力学(MD)シミュレーションを用いて、表面が原子レベルで平坦な六方晶窒化ホウ素基板とグラフェンの間に水分子が凝集する構造を作成し、それらの水分子の電気双極子モーメントの長時間平均を取ることで電気感受率を算出した。この計算により、温度 300K において一層だけ凝集した際の界面の水の電気感受率は 0.79 となり、実験で示されているバルク水の電気感受率 77.36[8]よりも非常に小さい値を示すことが明らかとなった。

- [1] T. A. Ho and A. Striolo, J. Chem. Phys. **138**, 054117 (2013).
- [2] A. Akaishi, T. Yonemaru, and J. Nakamura, ACS Omega **2**, 2184 (2017).
- [3] K. Suzuki, N. Oyabu, *et al.*, Applied Physics Express **4**, 125102 (2011).
- [4] Y. Maekawa, K. Sasaoka, T. Yamamoto, Jpn. J. Appl. Phys. **57**, 035102 (2018).
- [5] M. Schriver, *et al.*, ACS Nano **7**, 7, 5763-5768 (2013).
- [6] Y. Homma, S. Chiashi, T. Yamamoto, *et al.*, Phys Rev Lett, **110**, 157402 (2013)
- [7] Y. Maekawa, K. Sasaoka, T. Yamamoto, Applied Physics Express **12**, 115001 (2019).
- [8] R. Deul, Dielektrizitätskonstante und Dichte von Wasser-Benzol-Mischungen bis 400°C und 3000 bar, Ph.D. dissertation, University of Karlsruhe, Karlsruhe, Germany (1984).