

Annual Meeting of the Japan Society of Vacuum and Surface Science 2021

グラフェン表面に凝集した水のダイナミクスに関する 分子動力学シミュレーション

○木岡 夕星¹, 前川 侑毅², 笹岡 健二³, 山本 貴博^{1,3*}¹東京理科大学理学研究科, ²東京理科大学工学研究科, ³東京理科大学ウォーターフロンティア研究センター

Molecular dynamic simulations of the dynamics of the water adsorbed on the graphene surface

○Yusei Kioka¹, Yuki Maekawa², Kenji Sasaoka³ and Takahiro Yamamoto^{1,3*}¹ Graduate School of Science, Tokyo University of Science. ² Graduate School of Engineering, Tokyo University of Science.³ Water Frontier Research Center, RIST, Tokyo University of Science.

1. 研究背景

疎水性物質であるグラフェンやカーボンナノチューブ (CNT) の表面には、水が凝集しないと考えられてきた。しかし近年の研究によって、これらの表面には大気圧雰囲気下において水分子が層状に凝集していることが明らかとなった¹⁻³。この水分子の層はバルク水と比べ3倍以上の密度を示す特異な水であることが報告されている^{4,5}。また、この界面水は特異的な安定構造 (運動の自由度が凍結した正四面体構造) をもつことが我々の先行研究 (分子動力学 (MD) 法+パーシステントホモロジー法) によって予測された。この界面水の厚さは水分子3層程度 (約1nm) であり、グラフェンから3層以上離れた領域ではバルク水のように振る舞うことが分かっている⁵。

しかしながら、界面水での水分子のダイナミクスの定量的な評価には至っておらず、今後、界面水の物性を定量評価するためには、その評価が不可欠である。そこで本研究では、MDシミュレーションにより、グラフェン表面での界面水の水の回転自己相関関数を計算し、バルク水と比較することで、界面水のダイナミクスの定量評価を行う。

2. 研究手法及び結果

MDシミュレーションを用いてグラフェン表面に水分子を凝集させ、水分子の電気双極子モーメントから層ごとの回転自己相関関数を算出し、回転運動を解析した。結果をFig.1に示す。縦軸は回転自己相関関数、横軸はシミュレーション時間であり、黒色の丸が界面

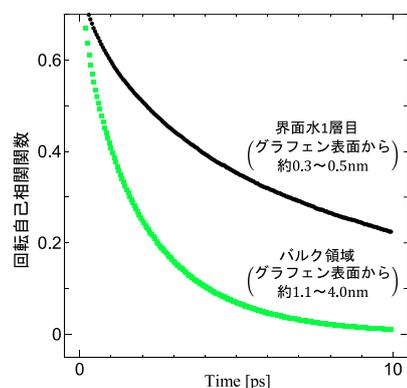


Fig. 1. 回転自己相関関数の算出結果

水1層目、緑色の四角がバルク領域の結果である。この結果から、バルク領域では収束値が0となり完全にランダムな回転運動を示すのに対し、界面水1層目では有限値に収束し回転自由度が制限された状態であることが明らかとなり、これまでの先行研究で解析された構造の回転運動を定量的に示す結果となった。

文 献

- 1) T. A. Ho and A. Striolo: J. Chem. Phys. **138**, 054117 (2013).
- 2) Y. Maekawa, K. Sasaoka, T. Yamamoto: Jpn. J. Appl. Phys. **57**, 035102 (2018).
- 3) Y. Homma, S. Chiashi, T. Yamamoto, *et al.*: Phys Rev Lett, **110**, 157402 (2013)
- 4) Y. Maekawa, K. Sasaoka, T. Yamamoto: Applied Physics Express **12**, 115001 (2019).
- 5) K. Kato, Y. Maekawa, N. Watanabe, *et al.*: Jpn. J. Appl. Phys. **59**, 025001 (2020).

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