

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

カーボンナノチューブに内包された水分子の 回転運動の分子動力学解析

○笹岡 健二¹, 山本 貴博^{1,2*}¹東京理科大学ウォーターフロンティア研究センター, ²東京理科大学理学部

Molecular dynamics analysis for rotational motion of water molecules encapsulated in a carbon nanotube

○Kenji Sasaoka¹ and Takahiro Yamamoto^{2*}¹Water Frontier Research Center, RIST, Tokyo University of Science ²Graduate School of Science Tokyo University of Science

1. はじめに

ナノ空間に閉じ込められた水の固相は、最もよく知られた六方晶系の氷と異なる結晶構造になり、カーボンナノチューブ(Carbon NanoTube, CNT)に内包された氷はその典型的な例である。この氷はアイスナノチューブ(ice-NanoTube, ice-NT)と呼ばれ、ice-NTの断面はCNTの直径に依存して様々な多角形構造になることが知られている[1]。ice-NTの存在はすでにX線回折や核磁気共鳴(Nuclear Magnetic Resonance, NMR)の実験により確認され、現在でもCNT内包氷は理論的・実験的に研究され続けている[2, 3]。それらの研究の中で、CNT内包氷の相図は学術的な観点から最も興味深い研究対象の1つである。通常、大気圧下で温度を上げれば、氷は固相から液相へと一次相転移し、液相における水分子は完全にランダムな並進・回転運動をする。一方、CNTに内包された水分子はCNTの内壁によって自由に並進・回転運動することができない、すなわち、CNTに内包された氷はice-NT(固相)から不完全な液相に変化すると考えられる。したがって、CNT内包氷の相変化は一次相転移と異なると容易に推測でき、この相変化を解明すべくNMR実験が試みられている。しかしながら、NMRは相転移・相変化近傍の水分子の運動の時間スケールを調べるのに適した実験手法であるものの、NMRの実験だけでは水分子の微視的運動を明らかにすることは難しい。

本研究ではCNT内包氷の相変化を明らかにするために、分子動力学(Molecular Dynamics, MD)法を用いて、CNT内部の水分子の微視的運動をシミュレートし、最終的にNMRの実験の観測量に関係する回転運動を解析

することが目的である。

2. 方法

本MDシミュレーションでは、CNTの直径を10Å、長さを2130Å(カイラリティは(13, 0)、炭素原子数26000個)、CNTに内包された水分子を2000個とした。また、水分子をSPC/Eモデルとして取り扱い、CNTを固定、水分子とCNT間の相互作用にUFF力場(カットオフは15Å、静電相互作用の計算手法はエバルト和)を使用した。境界条件は周期境界条件である。このシミュレーションモデルに対して、温度を能勢・フーバー法で制御したNTVアンサンブルを100psまで実行した。また、比較のため、同数の水分子のバルク水の計算も行い、回転自己相関関数の評価を行った。

3. シミュレーション結果

CNT内包氷の場合、時間が経つにつれて回転相関関数が減少して有限の値に収束しているのに対し、バルク水の場合、0の値に収束していることが本数値計算によりわかった。これは、前述したとおり、バルク水では水分子がランダムな回転運動をしているのに対して、CNT内包氷の水分子が完全にランダムでない回転運動を示している。

文 献

- 1) K. Koga et al., Nature **412**, 802 (2001).
- 2) H. Kyakunot, et al., J. Chem. Phys. **134**, 244501 (2011).
- 3) C. Calero, J. Martí, and E. Guàrdia, J. Phys. Chem. B, **119**, 1966 (2015).

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