

座屈状態のカーボンナノチューブに生じる波状変形モード解析

| | | |
|---------------|------|------|
| 北海道大学大学院工学院 | ○学生員 | 池岡直哉 |
| 北海道大学大学院工学院 | 学生員 | 小池育代 |
| 北海道大学大学院工学研究院 | 正員 | 佐藤太裕 |
| 東京大学生産技術研究所 | 非会員 | 梅野宜崇 |
| 山梨大学大学院総合研究部 | 非会員 | 島弘幸 |

1. まえがき

カーボンナノチューブ(Carbon Nanotube, 以下 CNT)とは、炭素原子の六員環ネットワークが連なり、形成された層(グラフェンシート)を円筒状に丸めた物質である。CNTは、優れた強度、高弾性力を持つという力学的特性や、高熱伝導特性、高い電気伝導性も保持しているため構造材料や電子材料として利用されている。

本研究では、多層CNT(Multi-Walled Carbon Nanotube, 以下 MWCNT)の層数と最内層直径を変え、载荷方法の違いが座屈荷重 P_{cr} や座屈モードにどのような影響を与えるのか比較検討することを目的とした。解析モデルとしてCNTを1層ごとに連続体で近似し解析を行う円筒シェル理論を用いた。また载荷方法として、常に中心方向に一定圧力を作用させる ring 载荷と、最外層面の各点における法線方向に静水圧を作用させる wall 载荷を用い、MWCNTの座屈挙動の解析を行った。

2. 解析モデル

図-1は解析対象とするCNTの解析モデルの断面図を示したものである。 N 層のMWCNT(ヤング係数 E , ポアソン比 ν , 層厚 h , i 層における半径 a_i)を円筒シェルとしてモデル化し、半径方向に対し圧力が作用する状態を考える。CNTは軸方向に非常に長い構造であることから平面ひずみ状態であることを仮定し、径に対し非常に薄いとして薄肉理論を採用する。

また、炭素原子に働くvdW力は近接する層の全ての炭素原子に働き、影響を与え合う。このvdW力を層ごとに層全体で積分し、出てきた半径方向の力を仮のバネに働く力と見立てる。

3. 定式化

この場合のMWCNTの全ポテンシャルエネルギーは、円周方向の伸びによるエネルギー U_M と曲げによるエネルギー U_B , 近接する層間に作用するvdW力によるエネルギー U_I , 外圧力 p によるエネルギーの総和として次

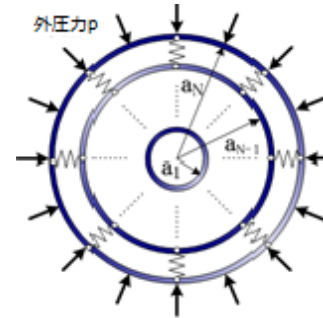


図-1 解析モデル CNT の断面図式で表される。

$$U = U[u_i, v_i, p] = U_M + U_B + U_I + \Omega \tag{1}$$

i 層の半径方向および円周方向における座屈変位を u_i, v_i として、 N 層におけるMWCNTの U_M, U_B はそれぞれ以下のように表すことができる¹⁾。

$$U_M = \sum_{i=1}^N \frac{\alpha_i a_i^2}{2} \int_0^{2\pi} \left[\frac{v_i' + u_i}{a_i} + \frac{1}{2} \left(\frac{v_i - u_i}{a_i} \right)^2 \right]^2 d\theta \tag{2}$$

$$U_B = \sum_{i=1}^N \frac{\beta_i a_i^4}{2} \left(\frac{v_i' - u_i''}{a_i^2} \right)^2 d\theta \tag{3}$$

また、 α_i, β_i は以下のように表される。

$$\alpha_i = \frac{Eh}{(1-\nu^2)a_i}, \quad \beta_i = \frac{Eh^3}{12(1-\nu^2)a_i^3} \tag{4}$$

U_I は文献2)より次式で表すことができる。

$$U_I = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{c_{i,i+1} [(a_i + a_{i+1})/2]}{2} \int_0^{2\pi} (u_i - u_{i+1})^2 d\theta \tag{5}$$

外圧力によるエネルギー Ω は N 層のみにはたらき、ring 载荷と wall 载荷での Ω をそれぞれ Ω_r, Ω_w とすると、文献1)より次式で表される。

$$\Omega_r = p \int_0^{2\pi} \left[u_N a_N + \frac{v_N^2}{2} \right] d\theta \tag{6}$$

$$\Omega_w = p \int_0^{2\pi} \left[u_N a_N + \frac{v_N^2 - u_N' v_N + u_N v_N' + u_N^2}{2} \right] d\theta \tag{7}$$

上記の過程により得られたポテンシャルエネルギーに変分原理を適用することによって、座屈現象に対応する支配方程式を得ることができる。その支配方程式に

キーワード カarbonナノチューブ, 円筒シェル理論, 波状変形モード, 座屈

連絡先 〒060-0808 北海道札幌市北区北8条西5丁目 北海道大学大学院工学院 TEL011-706-6177

対して座屈後の変位を座屈形状の波数 n を用いて表す.

$$\begin{aligned} v_i &= B_i \sin n\theta \\ u_i &= C_i \cos n\theta \end{aligned} \quad (8)$$

B_i, C_i はそれぞれ変位振幅を表す係数とする. これを支配方程式に代入することで, 以下の代数方程式を得る.

$$\mathbf{V}\mathbf{u} = \mathbf{0} \quad (9)$$

これより座屈荷重は次式により得られる.

$$\det(\mathbf{V}) = 0 \quad (10)$$

4. 解析結果

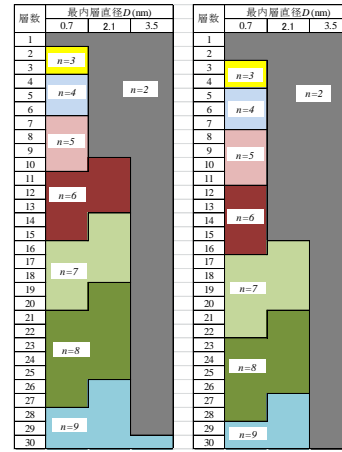
図-2 はそれぞれの荷重方法での各層数における座屈波数 n を表したものである. $n = 2$ の時は楕円モードであり, $n \geq 3$ は波状変形モードを示す. 楕円モードから $n \geq 3$ の波状変形モードに変化している境界を比べると, ring 荷重では wall 荷重よりも少ない層数で波状変形モードに変化していることから, 荷重方法の違いが生じるモードにも影響を与えることがわかる.

図-3 は層数が 1 層, 15 層, 30 層の CNT における最内層直径の変化に対する座屈荷重の比の変化を表したものである. ring 荷重での座屈荷重を $P_{cr-ring}$, wall 荷重での座屈荷重を $P_{cr-wall}$ とし, 縦軸を $P_{cr-ring}$ に対する $P_{cr-wall}$ の比 $P_{cr-ring} / P_{cr-wall}$ とした. 1 層では最内層直径 D が変化しても座屈荷重の比は約 1.5 を保持する. 一方, 15 層と 30 層では, 最内層直径が大きくなると座屈荷重の比が 1 に近い値から約 1.45 まで増加する.

図-4 は最内層直径 $D = 0.7\text{nm}, 2.1\text{nm}, 3.5\text{nm}$ の CNT における層数の増加に対する座屈荷重の比の変化を表したものである. 縦軸は座屈荷重の比 $P_{cr-ring} / P_{cr-wall}$ を表し, 横軸は層数を表す. $D = 0.7\text{nm}$ では座屈荷重の比が層数の増加とともに 1.5 から 1 に近づいていく. また, $D = 2.1\text{nm}$ では, $N < 10$ の時は座屈荷重の比が 1.4 以上あり, $10 \leq N \leq 15$ で減少していき, $N > 15$ では 1 に近い値となることがわかる. 図-2 より $D = 2.1\text{nm}$ において, $N < 10$ では荷重方法の違いによらず $n = 2$ の楕円モードが現れ, $10 \leq N \leq 15$ では ring 荷重で楕円モードから波状変形モードに変化し, $N > 15$ では 2 つの荷重方法で共に波状変形モードとなることから, 波状変形モードが起こる MWCNT では, 荷重方法の違いが座屈荷重に与える影響は少ないといえる. $D = 3.5\text{nm}$ では層数が増加しても楕円モードが現れるため座屈荷重の比は 1.4 以上を示している.

5. まとめ

- ・MWCNT の断面座屈では, 荷重方法の違いが生じる



(a)ring 荷重 (b)wall 荷重
図-2 座屈波数に関する相図

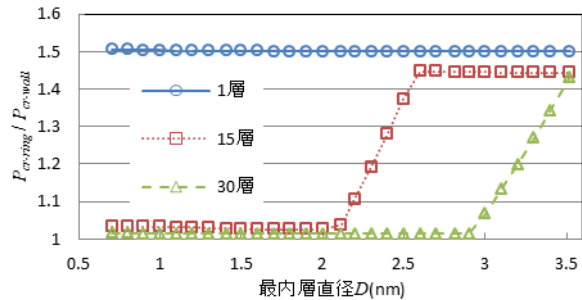


図-3 最内層直径と座屈荷重の関係

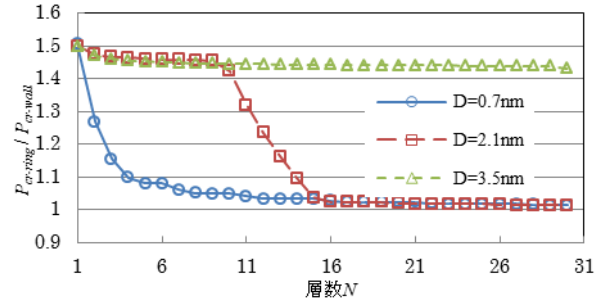


図-4 層数と座屈荷重の関係

モードにも影響を与えることが確認された.

- ・座屈モードが楕円モードとなるとき, 荷重方法の違いにより座屈荷重に約 1.5 倍の差が出ることを確認された. また, 波状変形モードとなるときは荷重方法が座屈荷重に与える影響は少ないといえる.

謝辞

本研究は科研費若手研究(A)(研究課題番号: 24686096, 研究代表者: 佐藤太裕)により実施されたことを付記し, 関係各位にお礼申し上げます.

参考文献

- 1) B.O. Bruth and B.O.Almroth: Buckling of Bars, Plates and Shells, McGraw-Hill, 1975
- 2) H. Shima, S. Ghosh, M. Arroyo, K. Iiboshi, M. Sato : Thin-shell theory based analysis of radially pressurized multiwall carbon nanotubes. Computational Materials Science. Volume 52, Issue 1, February 2012, Pages 90-94