

多層カーボンナノチューブに生じる特異な断面変形挙動の分子動力学解析

北海道大学大学院工学院	○学生員	谷内 湧
北海道大学大学院工学院	学生員	池岡 直哉
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
北海道大学大学院工学研究院	正 員	佐藤 太裕

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 の特徴は、優れた強度、しなやかな弾性力という力学的特性、そして高熱伝導特性や特異な電気的性質を保持している点である。現在、これらの特徴からスポーツ製品や電子材料など幅広い分野で利用されている。既往の研究では、線形弾性領域における解析が可能な円筒シェル理論ベースの連続体近似手法を用いて座屈点までの挙動を導出してきた。この手法は簡便であり、変形が小さい領域では精度上問題はないが、大変形を伴う挙動や断面変形による電気的性質の変化などを正確に検証することは不可能である。

本研究では、原子ひとつひとつの運動を追跡することでより厳密な挙動解析を可能とする分子動力学法 (Molecular Dynamics Method, 以下 MD 法) を用いて wall 載荷における単層 CNT(Single-Walled Carbon Nanotube, 以下 SWCNT)及び多層 CNT(Multi-Walled Carbon Nanotube, 以下 MWCNT)の合計12種類のCNTについて解析を行い、最内層直径や層数が座屈荷重や座屈モードに及ぼす影響について分析するとともに、円筒シェル理論を用いて求めた座屈荷重について比較を行った。

2. 解析モデル

本研究では、ジグザグ型の構造を持つ CNT を対象とした。また計算の際、CNT は軸方向にのみ周期境界条件を適用する事で、無限の長さを持たせた。

図-1 から図-3 は解析対象とする CNT のひとつであるカイラルベクトルが $(n,0)=(9,0)/(18,0)/(27,0)/(36,0)$ の MWCNT の断面図と側面図、俯瞰図を一例として示したものである。

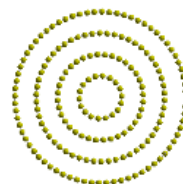


図-1 解析モデル CNT 断面図



図-2 解析モデル CNT 側面図

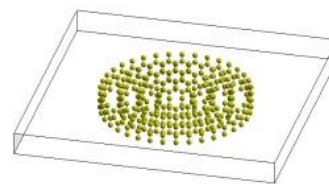


図-3 解析モデル CNT 俯瞰図

本研究では最内層直径が一致する1層から4層のCNTについて、MD法による座屈荷重と円筒シェル理論により求めた座屈荷重について比較する。また、それぞれの座屈モードについて座屈モード図としてまとめた。

3. 定式化

MD法とは原子シミュレーションのひとつ、原子の運動(位置、速度データ)を追跡することで物質の特性を評価する方法である。MD法では物質系ではなく、ニュートン力学に従う質点系として原子を取り扱う。そして他の原子からの力を受けながら、運動する N 個の原子ひとつひとつに (1) 式で表される運動方程式を立てる。

$$\frac{d^2 r_i}{dt^2} = \frac{F_i}{m_i} \quad i=1,2,\dots,N \quad (1)$$

三次元空間では、(1) 式は $3N$ 個の連立二階常微分程

キーワード カーボンナノチューブ 分子動力学法 円筒シェル理論 座屈 波状変形

連絡先 〒060-8628 北海道札幌市北区北13条西8丁目 北海道大学大学院工学院 TEL 011-706-6115

式となる．よってこの式は解析的には解けないため，数値積分を行う．この時粒子 i の位置を r_i ，速度を v_i とすると，

$$r_i(t + \Delta t) = 2r_i(t) - r_i(t - \Delta t) + (\Delta t)^2 \frac{F_i(t)}{m_i} \quad (2)$$

$$v_i(t) = \frac{1}{2\Delta t} \{r_i(t + \Delta t) - r_i(t - \Delta t)\} \quad (3)$$

(2), (3) 式のように表される．(2), (3) 式を利用して，粒子の位置と速度を求める¹⁾．

本研究では，SWCNT においては CNT の変形を検証する際に一般的に使われる Brenner の原子間ポテンシャル関数²⁾を用いた．そして，MWCNT においては原子間相互作用ポテンシャルに MWCNT における共有結合と非共有結合との結合変化についても考慮できる AIREBO ポテンシャル³⁾を用いた．

4. 考察

図-4 は wall 载荷による载荷法で MD 法による座屈荷重と円筒シェル理論により求めた座屈荷重を最内層直径が一致する CNT について比較したものである．この図より，最内層直径が大きいものほど円筒シェル理論の座屈荷重と近い値が得られることがわかる．また，最内層のカイラルベクトルが(9,0)の CNT では，層数が多いほど円筒シェル理論の座屈荷重に近い結果が得られることがわかった．これらの結果より，層数が少なく直径が小さい CNT では，円筒シェル理論による座屈荷重の近似計算が困難であると考えられる．

図-5 は本研究で対象とした CNT の座屈モードの関係性をまとめたものである．この図から最内層直径が大きく，層数が少ない領域では CNT は座屈モード $n = 2$ の楕円モードになり，最内層の直径が小さく，層数が多い領域では $n > 2$ の波状変形が起きるという傾向が確認できる．また，MWCNT では座屈直後に最内層は円形を保つことが確認された．

5. まとめ

- ・ 層数が多く最内層直径が大きい CNT では，円筒シェル理論は座屈荷重を定量的に評価する手法として有効であることを確認した．
- ・ 最内層直径と層数に応じて座屈モードが変化し，MWCNT の座屈時においては，最外層は波状変形が起きる一方で，最内層は円形を保持するという，円筒シェル理論により発生が予測された現象が分子動力学法により再現された．

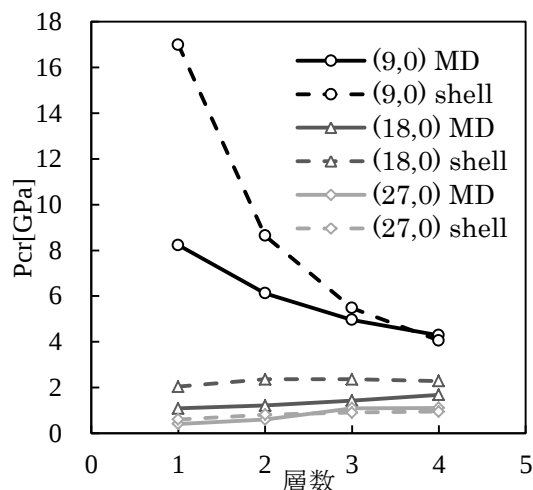


図-4 最内層直径が一致する CNT の座屈荷重比較

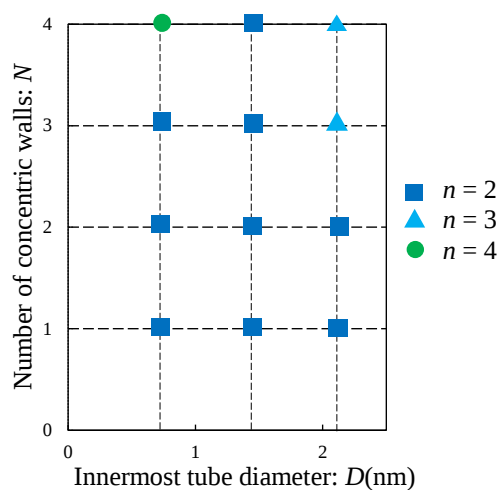


図-5 座屈モード図 (MD 法)

謝辞

本研究は科研費基盤研究(B)(研究課題番号：15H04207，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) 上田顯：コンピュータシミュレーション-マクロな系の中の原子運動-，第三版，朝倉書房，1992，ISBN 4-254-12069-9 C304
- 2) Brenner, D. W., Shenderova, O. A., Harrison, J. A., Stuart, S.J., Ni, B. and Sinnott: A second-generation reactive empirical bond order (REBO) potential energy expression for hydrocarbons, Journal of Physics Condensed Matter, 14(2002), pp.783-802.
- 3) Stuart, S. J., Tutein, A.B. and Harrison, J. A.: A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions, Journal of Chemical Physics, 112(2000), pp.6472-6486.