弾性体中の2層カーボンナノチューブの半径方向圧力作用に対する

座屈挙動の解析

BUCKLING CHARACTERISTICS OF DOUBLE-WALLED CARBON NANOTUBES EMBEDDED IN AN ELASTIC MEDIUM UNDER EXTERNAL PRESSURE

| 北海道大学工学部 | ○学生員 | 飯干晃太朗 | (Kotaro IIBOSHI) |
|---------------|------|-------|-------------------|
| 北海道大学大学院工学研究科 | 正 員 | 佐藤太裕 | (Motohiro SATO) |
| 北海道大学大学院工学研究科 | 学生員 | 嶋崎賢太 | (Kenta SHIMAZAKI) |

1. はじめに

本研究は、弾性体中の2層カーボンナノチューブ (Double-walled Carbon Nanotube,以下DWCNT)における 静水圧状の荷重に対する弾性座屈特性の把握を、連続体 力学に基づく形で行うことを目的としている.カーボン ナノチューブは炭素原子によって作られるネットワーク (グラフェンシート)が構成する内径数 nm 程度の単層 または多層の円筒状の物質である¹⁾.近年その極めて優 れた引張強度特性や電気伝導性に注目が集まり、実験、 解析両面から多方面に渡る研究が世界的に進められてい る.本研究では、引張に比べ比較的弱いとされる半径方 向の座屈挙動を解析的に明らかにする.

2. 解析モデル



図-1 2層カーボンナノチューブの解析モデル

図-1 は解析対象とする DWCNT のモデル図を示した ものである.弾性体(ヤング係数 E_c ポアソン比 v_c)中 における2層 CNT(ヤング係数E,ポアソン比v,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、 半径方向に対し圧力が作用する状態を考える.CNT は 径に対し非常に長い構造であることから平面ひずみ状態 を仮定し,径に対して非常に薄いとして薄肉理論を適用 する.また、外力は外側の層に作用する状態を仮定する.

2. 座屈挙動の定式化

この場合全ポテンシャルエネルギーは、円周方向の 伸びおよび曲げによるひずみエネルギー U_M , U_B , 弾 性体から受ける力によるひずみエネルギー U_C , 近接す る層間に作用する van del Waars(vdW)力によるエネルギ $-U_I$,および外圧力によるエネルギー Ω の総和として 次式で与えられる.

$$U = U \left[u_i(\theta), v_i(\theta) \right] = U_M + U_B + U_C + U_I + \Omega$$

(1)

式(1)において, *i*層の半径, 円周方向の変位 u_i , v_i に対して U_M , U_B ,および Ω はそれぞれ次式のように得られる²⁾.

$$U_{M} = \sum_{i=1}^{2} \frac{\alpha_{i} a_{i}^{2}}{2} \int_{0}^{2\pi} \left[\frac{v_{i}' + u_{i}}{a_{i}} + \frac{1}{2} \left(\frac{v_{i} - u_{i}'}{a_{i}} \right)^{2} \right]^{2} d\theta$$
(2)

$$U_B = \sum_{i=1}^{2} \frac{\beta_i a_i^4}{2} \int_0^{2\pi} \left(\frac{v_i' - u_i''}{a_i^2} \right)^2 d\theta$$
(3)

$$\Omega = p \int_0^{2\pi} \left[u_i a_i + \frac{1}{2} \left(v_i^2 - u'_i v_i + u_i v'_i + u_i^2 \right) \right] d\theta \tag{4}$$

ここで

$$\alpha_i = \frac{Eh}{\left(1 - \nu^2\right)a_i} \tag{5a}$$

$$\beta_i = \frac{Eh^3}{12\left(1 - \nu^2\right)a_i^3} \tag{5b}$$

弾性体によりシェルにかかる応力とせん断応力を σ_r , $\tau_{r\theta}$ として U_C は次式で得られる.

$$U_C = -\frac{a_2}{2} \int_0^{2\pi} (\sigma_r u_2 + \tau_{r\theta} v_2) d\theta \tag{6}$$

ここで $\sigma_r, \tau_{r\theta}$ は文献 3)より以下の式を用いる.

$$\sigma_r = \left(S^{(1)}u_2 + S^{(2)}v_2\right)\cos n\theta \tag{7a}$$

$$\tau_{r\theta} = \left(S^{(2)}u_2 + S^{(1)}v_2\right)\sin n\theta \tag{7b}$$

$$S^{(1)} = -\frac{K}{2(3-\mu)a_2} \left[\frac{4(n+1)}{1+\mu} - 2 \right]$$
(8a)

$$S^{(2)} = -\frac{K}{2(3-\mu)a_2} \left[\frac{4(n+1)}{1+\mu} - 2n \right]$$
(8b)

$$K = \frac{E_C}{1 - v_C^2} \tag{9a}$$

$$\mu = \frac{\nu_C}{1 - \nu_C} \tag{9b}$$



 図-2 弾性体のヤング係数 E_C の座屈荷重 p_{cr} に 及ぼす影響と座屈のモード n の値

またU」は以下の形で得られる.

$$U_{I} = \frac{c_{12}a_{1}}{2} \int_{0}^{2\pi} \left(u_{1} - u_{2}\right)^{2} d\theta + \frac{c_{21}a_{2}}{2} \int_{0}^{2\pi} \left(u_{2} - u_{1}\right)^{2} d\theta$$
(10)

vdW 力に関する係数は文献 4) より次式を用いる.

$$c_{ij} = -\left(\frac{1001\sigma^{12}}{3D^4}g_{ij}^{13} - \frac{1120\sigma^6}{9D^4}g_{ij}^{7}\right)\pi\varepsilon a_j$$
(11)

$$g_{ij}^{\ m} = \frac{1}{a_i + a_j} \int_0^{2\pi} \frac{1}{\sqrt{1 - b_{ij} \cos^2 \theta}} d\theta$$
 (12a)

$$b_{ij} = \frac{4a_i a_j}{(a_i + a_j)^2}$$
(12b)

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り,以下の座屈現象に対応す る支配方程式が得られる.

$$\alpha_1(v_1 + u_1)' + \beta_1(v_1 - u_1')'' = 0$$
(13a)

$$\alpha_1(v_1' + u_1) - \beta_1(v_1 - u_1')''' + c_{12}a_1(u_1 - u_2) = 0$$
(13b)

$$\alpha_{2}(v_{2}' + u_{2})' + \beta_{2}(v_{2} - u_{2}')'' + a_{2}(S^{(1)}v_{2} - \frac{1}{n}S^{(2)}u_{2}') = 0$$
(14a)

$$\alpha_{2}(v_{2}'+u_{2}) - \beta_{2}(v_{2}-u_{2}')'' + p(u_{2}''+u_{2})$$
(14b)

$$-a_2(S^{(i)}u_2 + -S^{(i)}v_2) - c_{21}a_2(u_1 - u_2) = 0$$

こで i 層の 恋位 として 次式 を仮定する

$$u_i(\theta) = L_i \cos n\theta$$

$$v_i(\theta) = M_i \sin n\theta$$
(15a)
(15b)

これを式(13)および(14)に代入することで、以下の代数 方程式を得られる.

$$\det(\mathbf{C}) = 0 \tag{17}$$

3. 解析結果

内側の層の径 a_1 の値は 4.0[nm]とした. 図-2 は弾性体と CNT のヤング係数の比 E_C/E に対する座屈荷重 p_{cr} の値を CNT の厚さhごとに示したものであり, ま



図-3 座屈荷重 p_{cr}の層数による比較と 座屈のモードnの値

た、図-3 はそれを h = 0.08[nm] として層数ごとに示し たものである.図-2 より、一定の h においては弾性体 のヤング係数が増加するにつれて座屈荷重も増加してい くことがわかる.また、その時の座屈のモード n の値は 次第に増加していく.ヤング係数を一定にして見ると、 層が厚くなっていくほど座屈荷重が大きくなっていくこ とがわかる.次に図-3より、等しい E_C においては単層 より 2 層の方が座屈荷重が大きい.さらに、弾性体のヤ ング係数が小さくなるにつれて層数による座屈荷重の差 がなくなっていくことが読み取れる.

4. まとめ

本研究では、以下の事が明らかとなった.

- ・弾性体のヤング係数が増加すると座屈荷重は増加し, モードnの値は大きくなる
- CNT が厚いと薄い場合より座屈荷重が大きくなり、モードnの値は小さくなる
- ・単層より2層の方が座屈荷重は大きくなるがその差は
 弾性体のヤング係数に依存する

今後はチューブ層数を増加させた解析を進めることで、 多層カーボンナノチューブにおいてみられる特徴的な座 屈挙動⁵⁾における周囲の弾性体の影響について研究を進 めていく予定である.

参考文献

- Iijima, S:Helical microtubes of graphitic carbon, Nature, 354, pp.56-58, 1991.
- D.O.Bruth and B.O.Almroth: Buckling of Bars, Plates and Shells, McGraw-Hill, 1975.
- James G.A. Croll: Buckling of cylindrical tunnel liners: Journal of Engineering Mechanics, pp.333-341,2001
- He, X.Q., Kitipornchai, K.M. and Liew, K.M.: Buckling analysis of multi-walled carbon nanotubes: a continuum model accounting for van del Waals interaction, J. Mech. Phys. Solids, Vol.53, pp.303-326,2005.
- Shima, H. and Sato, M: Multiple radial corrugations in multiwalled carbon nanotubes under pressure, Nanotechnology, 19(49), 495705, 2008.