

弾性体中における多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

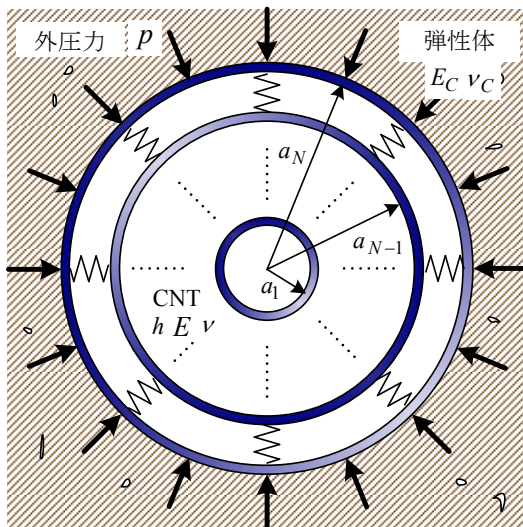
Buckling Characteristics of Multi-walled Carbon Nanotubes Embedded in an Elastic Medium under External Pressure

北海道大学大学院工学研究科 ○学生員 飯干晃太朗 (Kohtaroh 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 島 弘幸 (Hiroyuki Shima)
(現カタルーニャ大学)

1. はじめに

カーボンナノチューブ (Carbon Nanotube, 以下 CNT) 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や、金属にも半導体にもなりうるという特異な電気的性質など多くの特性に注目が集まり、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。そのような CNT の現在有用視されている応用方法のひとつに、他の弾性体に埋め込むことによって強度や電気伝導性を向上させた高性能複合材料として利用するという方法が挙げられる。本研究では、弾性体中の多層カーボンナノチューブ (Multi-walled Carbon Nanotube, 以下 MWCNT) 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。

2. 解析モデル



図一 解析モデル

図一は解析対象とする CNT のモデル図を示したものである。弾性体中(ヤング係数 E_C 、ポアソン比 ν_C) における 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、CNT の外層と弾性体は完全に密着しているものと仮定する。

3. 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 、外圧力によるエネルギー Ω 、弾性体から受ける力によるひずみエネルギー U_C 、および近接する層間に作用する van der Waals (vdW) 力によるエネルギー U_I の総和として次式で与えられる。

$$U = U[u_i, v_i, p] = U_M + U_B + \Omega + U_C + U_I \quad (1)$$

i 層の半径方向および円周方向の変位 u_i 、 v_i に対して U_M 、 U_B および Ω は次式のように得られる²⁾。

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

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

$$\Omega = p \int_0^{2\pi} \left[u_N a_N + \frac{v_N^2 - u_N' v_N' + u_N v_N' + u_N'^2}{2} \right] d\theta \quad (4)$$

ただし

$$\alpha_i = \frac{Eh}{(1-\nu^2)a_i} \quad (5)$$

$$\beta_i = \frac{Eh^3}{12(1-\nu^2)a_i^3} \quad (6)$$

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

$$U_C = -\frac{a_N}{2} \int_0^{2\pi} (\sigma_r u_N + \tau_{r\theta} v_N) d\theta \quad (7)$$

ここで σ_r 、 $\tau_{r\theta}$ は文献³⁾ より以下の式を用いる。

$$\sigma_r = (S_1 \bar{u}_n + S_2 \bar{v}_n) \cos n\theta \quad (8)$$

$$\tau_{r\theta} = (S_2 \bar{u}_n + S_1 \bar{v}_n) \sin n\theta \quad (9)$$

$$S_1 = -\frac{K}{2(3-\mu)a_N} \left[\frac{4(n+1)}{1+\mu} - 2 \right] \quad (10)$$

$$S_2 = -\frac{K}{2(3-\mu)a_N} \left[\frac{4(n+1)}{1+\mu} - 2n \right] \quad (11)$$

$$K = \frac{E_E}{1-\nu_E^2} \quad (12)$$

$$\mu = \frac{\nu_E}{1-\nu_E} \quad (13)$$

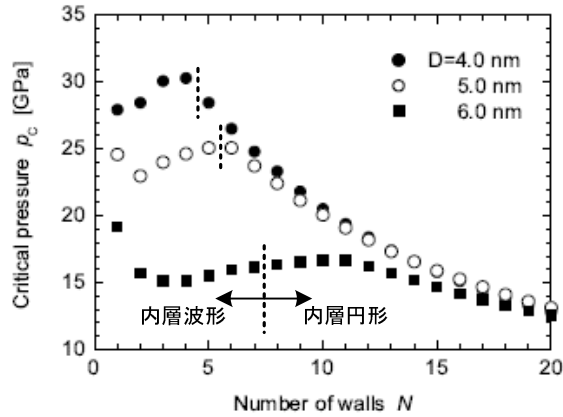
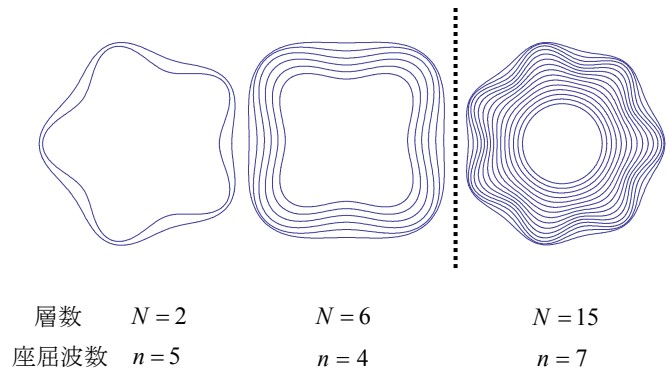


図-2 各内径における層数と座屈荷重の関係

図-3 $D = 6.0[\text{nm}]$ における座屈形状の例

また U_I は以下の形で得られる⁴⁾.

$$U_I = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{c_{i,i+1} a_i}{2} \int_0^{2\pi} (u_i - u_{i+1})^2 d\theta \quad (14)$$

$$c_{ij} = - \left(\frac{1001\pi\epsilon\sigma^{12}}{3D^4} g_{ij}^{13} - \frac{1120\pi\epsilon\sigma^6}{9D^4} g_{ij}^7 \right) a_j \quad (15)$$

$$g_{ij}^m = \frac{1}{(a_i + a_j)^m} \int_0^{2\pi} \frac{1}{\sqrt{1 - b_{ij} \cos^2 \theta}} d\theta \quad (16)$$

$$b_{ij} = \frac{4a_i a_j}{(a_i + a_j)^2} \quad (17)$$

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、座屈現象に対応する支配方程式が得られる。その支配方程式に対して、座屈後の変位を座屈形状の波数 n を用いて表す。

$$\begin{aligned} v_i &= B_i \sin n\theta \\ u_i &= C_i \cos n\theta \end{aligned} \quad (18)$$

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られる。

$$\mathbf{V}\mathbf{u} = \mathbf{0} \quad (19)$$

これより弾性座屈荷重は次式により得られる。

$$\det(\mathbf{V}) = 0 \quad (20)$$

4. 解析結果

CNT のヤング係数に対する弾性体のヤング係数の比を $E_C/E = 0.1$ とした結果を図-2 と図-3 に示す。図-2 は 3 通りの最内層の内径 D についての層数と座屈荷重の関係を表したものである。図-2 より、座屈荷重の大きさは CNT の層数と内径に依存し、内径が大きくなると座屈荷重の値は減少することがわかる。さらにある程度層数が大きい場合においては、内径や層数による座屈荷重の変化の影響は小さく、最終的に座屈荷重は内径にかかわらずに一定の値に収束していく傾向があることが読み取れる。また、各破線の位置の層数を境界として、外層と内層が共に波形の座屈形状を示すものと、外層のみが座屈し内層は円形を保ったままという形を示すものの 2 種類の座屈形状が存在することがわかった。座屈荷重の増加の仕方も同じ境界において変化していて、内層

が円形になる領域では座屈荷重の値はほぼ単調に減少している。

そのような多様な座屈形状を表したものが図-3 である。図中に示されるそれぞれの層数と内径における CNT の座屈形状を示している。層数が小さい場合は内層も外層と同様に波形に座屈するのにに対し、層数が大きくなると内層は円形を保っている。これは層数が多い場合に、外層からの変位が内層まで伝達されないために起こる現象だと考えられる。

周囲の弾性体が無い場合 ($E_C/E = 0$) についても、層数に応じて内層まで座屈する場合と内層は円形を保ち続ける場合の 2 通りが存在するという結果を得ている⁵⁾。しかし、弾性体がない場合では内層は必ず $n=2$ の楕円形のモードで座屈を引き起こす。それに対して弾性体がある場合は、内層が楕円形以外の様々なモードで座屈をしている。これは特に CNT が添加された複合材料について、その特性が高圧下において様々に変化する可能性があることを意味している。

5. まとめ

本研究では以下の知見が得られた。

- (1) 最内層の座屈形状は層数の大きさに応じて円形と波形が存在する。
- (2) 弾性体がない場合に対して弾性体中の CNT は座屈形状が多様化する。

本研究では、高圧下における弾性体中の CNT の挙動を調べることで、それが複合材料の強度、電気や熱の伝導性などの特性に与える影響についての関連性を解析的に明らかにできることを期待している。

参考文献

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