

多層カーボンナノチューブの曲げ挙動における波状変形座屈モードの解析

Analysis on Rippling Modes for Multi-Walled Carbon Nanotubes under Bending

北海道大学大学院工学院 ○学生員 梶田寛人 (Hiroto Kajita)
 北海道大学大学院工学院 学生員 池田哲郎 (Tetsuro Ikeda)
 北海道大学工学部 学生員 石渡裕太 (Yuta Ishiwata)
 北海道大学大学院工学研究院 正員 佐藤太裕 (Motohiro Sato)

1. はじめに

チューブ構造は曲げを受けると、曲率の増加に伴って断面がつぶれ、最終的に崩壊に至る。その崩壊形式の中でも、圧縮側に波状のしわ、「Ripple」が生じる座屈モードは、ある程度の変形に対しても弾性的挙動をする円筒シェルにおいてよく知られる現象である。その中でも、ナノ材料として世界的注目を集めるカーボンナノチューブは(Carbon Nanotubes, 以下 CNT)は軽くて丈夫かつ非常にしなやかという力学的特性と、高い電気伝導性、熱伝導性を有している。また、中空形状のためスポーツ製品や電子材料など様々な分野で利用されている。

本研究では、多層カーボンナノチューブ(Multi-Walled Carbon Nanotubes, 以下 MWCNT)に焦点を当て、曲げ作用を受けて座屈した瞬間におけるチューブ圧縮側に生じる「Ripple」を解析的に記述する数理モデルを構築し、MWCNTの曲げ特性を検討することを目的としている。

2. 解析モデル

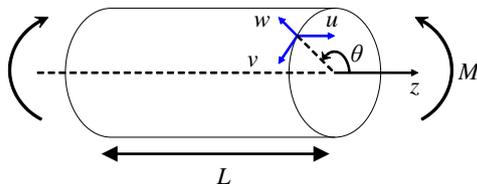


図-1 解析対象とする円筒シェル構造

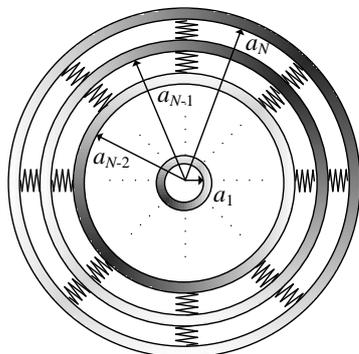


図-2 解析モデル(MWCNT)

図-1はCNT(厚さ t 、長さ L 、半径 a_N)に円筒シェル理論を適用しモデル化したものである。層が非常に薄い弾性体(ヤング係数 E)として薄肉理論を採用し、ポアソン比 ν の影響は考慮しないものとする。シェルは大

きさ M の純曲げを受けて軸方向に内外層に共通の曲率 C を生じ、最終的に崩壊へと至る。

図-2はMWCNT(層数 N 、層間距離 d)の断面を示したものである。層と層の間には van del Waals(vdW)力が働き、互いに影響を与えあふ。このvdW力を層ごとに積分し、出力された半径方向の力を仮のバネに働く力と見立てる。また、安定つり合い状態における断面の扁平は無視する。

3. 現象の定式化

i 層における任意の位置(a_i, θ, z)の半径、円周、軸方向変位をそれぞれ w_i, v_i, u_i とすると、変形により生じる円周方向と軸方向のひずみエネルギーはそれぞれ式(1)¹⁾、式(2)になる。ただし、微分記号 $'$ は式(1)では θ による微分、式(2)では z による微分を表す。

$$U_\theta = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} \int_0^L \int_0^{2\pi} \left[Et \left\{ \frac{v_i' + w_i}{a_i} + \frac{1}{2} \left(\frac{v_i - w_i'}{a_i} \right)^2 \right\}^2 \right. \\ \left. \oplus \frac{Et^3}{12} \left(\frac{v_i - w_i''}{a_i^2} \right)^2 \right] a_i d\theta dz \quad (1)$$

$$U_z = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} \int_0^L \int_0^{2\pi} \left[Et \left(u_i' + \frac{1}{2} w_i'^2 + \frac{1}{2} v_i'^2 \right) \right. \\ \left. + \frac{Et^3}{12} w_i''^2 \right] a_i d\theta dz \quad (2)$$

vdW力によるエネルギーは分子間力に関する係数 $c_{i,i+1}$ を用いて以下のように表わす²⁾。

$$U_i = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{c_{i,i+1} [(a_i + a_{i+1})/2]}{2} \int_0^L \int_0^{2\pi} (u_i - u_{i+1})^2 d\theta dz \quad (3)$$

ひずみエネルギー式に安定つり合い時の変位と座屈時の変位を足し合わせ代入する。

断面の扁平を考慮に入れないことから、安定つり合い状態の変形は軸方向のみとなる。

$$u_{i,0} = a_i C \left(z - \frac{L}{2} \right) \sin \theta \quad (4)$$

3次元解析において座屈時は半径方向の影響が非常に大きく、円周方向と軸方向の影響は考慮しなくてよいことがわかっている³⁾。したがって、座屈時の変形は半径方向のみを考え、変位の振幅成分 R_i, S_i, T_i を用いて以下

で表現する. ここで, n はチューブ軸方向の変位周期, すなわち座屈波数を表す.

$$w_{i,1} = \left[R_i + S_i \cos\left(\theta - \frac{\pi}{2}\right) + T_i \cos 2\theta \right] \sin \frac{n\pi}{L} z \quad (5)$$

最終的に,

$$\begin{aligned} u_i &= u_{i,0} \\ w_i &= w_{i,1} \\ v_i &= 0 \end{aligned} \quad (6)$$

座屈時の曲率を求めるため, 上記の変位をひずみエネルギー式に代入し 2 次の変分を求める.

$$\delta^2 U = \delta^2 U_\theta + \delta^2 U_z + \delta^2 U_l \quad (7)$$

ひずみエネルギーの 2 次変分を変位振幅で微分して座屈時の支配方程式を導き, それを解くことにより座屈時の曲率 C_{cr} を求める. ここで, C_{cr} を最小にする n を, 座屈が起こる場合の値とする.

$$\begin{aligned} \partial(\delta^2 U) / \partial R_i &= 0 \\ \partial(\delta^2 U) / \partial S_i &= 0 \\ \partial(\delta^2 U) / \partial T_i &= 0 \end{aligned} \quad (8)$$

また, 座屈時に断面に生じる曲げモーメント M_{cr} は,

$$M_{cr} = \int_0^{2\pi} EtC_{cr} [a_N \sin \theta]^2 a_N d\theta \quad (9)$$

4. 解析結果

最内層半径 $a_1 = 8.5\text{nm}$, 層間距離 $d = 0.3415\text{nm}$, ヤング係数 $E = 3.83\text{TPa}$, 厚さ $t = 0.09\text{nm}$ として解析を行なった.

図-3 は座屈時における曲げモーメント M_{cr} を各層数の MWCNT ごとにプロットしたグラフである. 層が増えるにつれ a_N が大きくなり, それに伴い曲げモーメントも増加する. また, 比較のためそれぞれの MWCNT の最外層半径 a_N に対応した半径を持つ単層カーボンナノチューブ (Single-Walled Carbon Nanotube, 以下 SWCNT) を合わせて表記した.

図-4 は横軸に層数, 縦軸に座屈波数 n を表したグラフである. 座屈波数は層数が増えると減少する. したがって, 層数が増えるほど座屈しやすくなることが読み取れる. 図-3 と同様に SWCNT についても表記した.

図-5 は「Ripple」の波形を 3 次元で図示したものである. $C^* = C_{cr} a_N$ として無次元化している. (a)よりチューブ圧縮側に波状のしわができていくことがわかる. (b)は波形の断面を拡大図示した. 外側の層ほど振幅が大きいことがわかる. これらより, 設定した変位式によって, 「Ripple」の座屈モードを概ね表現できていると言える.

5. まとめ

本研究を通し, MWCNT が曲げを受けたときに生じる波状のしわ「Ripple」を 3 次元の変位で表現し, 発生する曲率, 波数, 曲げモーメントを評価する解析手法を示せた. 今後は, 座屈モードを表現する変位形の改良や, より厳密なひずみエネルギーの定式化を予定している.

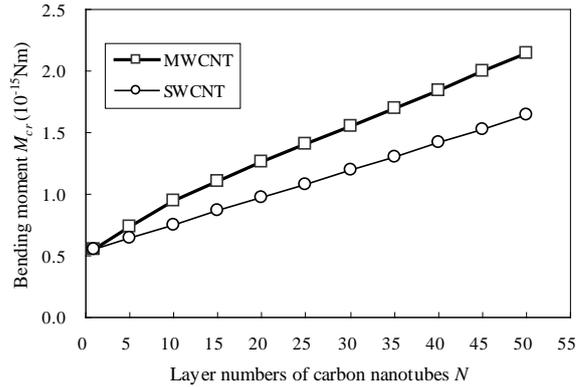


図-3 座屈時の曲げモーメント

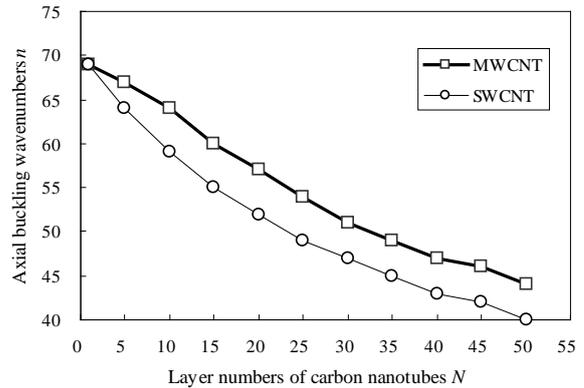
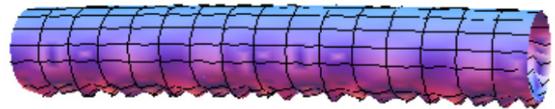
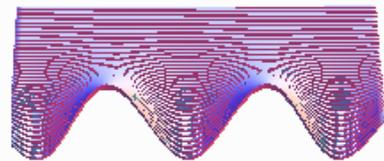


図-4 座屈波数



(a) 層数 $N=50$, 長さ $L=102\text{nm}$
曲率 $C^*_{cr}=0.0031$, 座屈波数 $n=44$



(b) Ripple 拡大図

図-5 座屈モード

6. 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 and M. Sato: Thin-shell theory based analysis of radially pressurized multiwall carbon nanotubes, Computational Materials Science, Vol.52 (1), pp.90-94 (2012)
- 3) X. Wang and H.K. Yang: Bending stability of carbon nanotubes, Phys. Rev. B 73 085409 (2006)