

静水圧荷重が作用する単層及び二層カーボンナノチューブにおける 座屈挙動解析モデルの精度検証

Accuracy verification of analytical models for Hydrostatically-pressurized Buckling of
Single- and Double-Walled Carbon Nanotube

北海道大学工学部

北海道大学大学院工学院

北海道大学大学院工学院

北海道大学大学院工学研究院

○学生員

学生員

学生員

正 員

小池育代

草野彩子

石渡裕太

佐藤太裕

(Ikuyo Koike)

(Ayako Kusano)

(Yuta Ishiwata)

(Motohiro Sato)

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。

従来の主な構造解析手法のひとつである円筒シェル理論では、一層ごとに連続体に近似し解析を行っていた¹⁾。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。

そこで本研究では、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, 以下 MD 法)を用い、静水圧荷重下での単層 CNT(Single-Walled Carbon Nanotube, 以下 SWCNT)及び二層 CNT(Double-Walled Carbon Nanotube, 以下 DWCNT)の座屈挙動を原子レベルで検証した。更に、DWCNT を対象として円筒シェル理論と原子情報を失わずに自由度を低減した解析を可能にする Coarse-grained computational method(以下, CGC 法)^{2,3)}との座屈荷重の比較を行った。

2. 解析モデル

Figure-1 は解析対象とする二層のカイラルベクトル $(m,0)=(9,0)/(18,0)$ の CNT の断面図, Figure-2 はその側面図, そして Figure-3 はその俯瞰図である。本研究では、ジグザグ型の構造を持つカイラルベクトル $(m,0)=(9,0)/(18,0)$, $(18,0)/(27,0)$, $(27,0)/(36,0)$, $(36,0)/(45,0)$ の DWCNT を対象とする。また計算の際、CNT は z 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る。

2.1 解析 1 DWCNT における MD 法と円筒シェル理論, CGC 法との座屈荷重比較

カイラルベクトル $(m,0)=(9,0)/(18,0)$, $(18,0)/(27,0)$, $(27,0)/(36,0)$, $(36,0)/(45,0)$ の DWCNT について静水圧荷重下での解析を行った。本解析では MD 法による座屈荷重と円筒シェル理論, CGC 法により求めた座屈荷重について比較する。

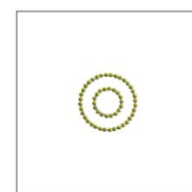


Figure-1 解析モデル CNT 断面図

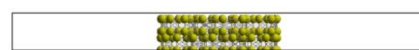


Figure -2 解析モデル CNT 側面図

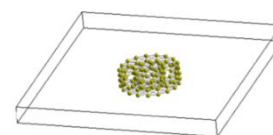


Figure -3 解析モデル CNT 俯瞰図

2.2 解析 2 SWCNT と DWCNT の座屈荷重の比較

カイラルベクトル $(m,0)=(36,0)$ の SWCNT と $(m,0)=(27,0)/(36,0)$ の DWCNT について MD 法による座屈荷重と円筒シェル理論, CGC 法により求めた座屈荷重について比較する。

2.3 解析 3 MD 法による大変形を伴う挙動の解析

カイラルベクトル $(m,0)=(36,0)$ の SWCNT と $(m,0)=(27,0)/(36,0)$ の DWCNT について座屈後の変形挙動を MD 法で追跡した。

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方程式となる。よってこの式は解析的には解けない為、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⁴⁾.

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⁵⁾を用いた. そして, DWCNT においては原子間相互作用ポテンシャルに DWCNT 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⁶⁾を用いた.

4. 考察

4.1 解析 1 DWCNT における MD 法と円筒シェル理論, CGC 法との座屈荷重比較

MD 法による DWCNT の座屈荷重と円筒シェル理論, CGC 法より求めた座屈荷重について比較したものが Figure-4 である. この図から一層ごとに連続体に近似して解析を行う円筒シェル理論でも, 厳密な挙動解析である MD 法及び CGC 法と同様な座屈荷重の変化が得られること, 直径が大きくなるほど近い座屈荷重が得られることが分かる.

4.2 解析 2 SWCNT と DWCNT の座屈荷重の比較

カイラルベクトル (m,0)=(36,0) の SWCNT と (m,0)=(27,0)/(36,0) の DWCNT について解析を行った結果が Table-1 であり, MD 法により求めた座屈荷重と円筒シェル理論, CGC 法との座屈荷重について比較した. 表より, SWCNT において MD 法, 円筒シェル理論及び CGC 法により求めた座屈荷重は比較的近い値が得られた. また, (m,0)=(36,0) の SWCNT よりも (m,0)=(27,0)/(36,0) の DWCNT の座屈荷重が大きくなった.

4.3 解析 3 MD 法による大変形を伴う挙動の解析

カイラルベクトル (m,0)=(36,0) の SWCNT と (m,0)=(27,0)/(36,0) の DWCNT について解析を行った結果 Figure-5, Figure-6 に示すような座屈形状となった. (m,0)=(36,0) の SWCNT は (m,0)=(27,0)/(36,0) の DWCNT は同様波数 n=2 の楕円型に座屈変形を起こした後, 短径部分が凹みひょうたんのような形状を示した.

5. まとめ

本研究から以下の知見が得られた.

- ・一層ごとに連続体に近似して解析を行う円筒シェル理論でも MD 法及び CGC 法と同様な座屈荷重の変化が現れ, 近い座屈荷重が得られた.
- ・最内層の直径が大きくなるほど座屈荷重が小さくなる.
- ・最外層が同じ直径の CNT の場合, SWCNT よりも DWCNT の座屈荷重が大きくなる.
- ・今後は, 層数を増やし多層での座屈荷重の導出や変位の導出といった定量的な検証に取り組む. また, 円筒シェル理論, CGC 法を用いた解析との数値的な比較も行う.

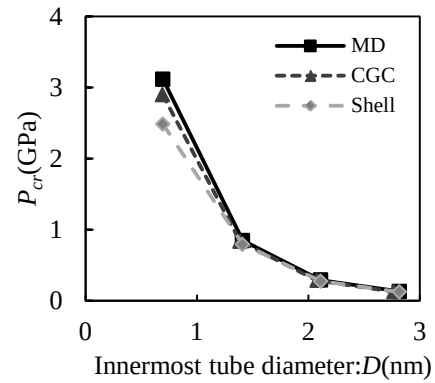


Figure -4 座屈荷重: P_{cr} の比較

Table-1 SWCNT と DWCNT の座屈荷重: P_{cr} (GPa) の比較

	Critical pressure of (m,0)=(36,0)	Critical pressure of (m,0)=(27,0)/(36,0)
MD	0.285	0.288
CGC	0.269	0.284
Shell	0.249	0.273



Figure -5 (m,0)=(36,0)の SWCNT 座屈後断面図



Figure -6 (m,0)=(27,0)/(36,0)の DWCNT 座屈後断面図

謝辞

本 MD 解析は東京大学生産技術研究所・梅野宜崇准教授山梨大学・島弘幸准教授の御指導の下実施いたしました. また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) および寿原記念財団研究助成 (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) H. Shima, M. Sato, Nanotechnology 19 (2008) 495705:1-495705:8
- 2) M. Arroyo and T. Belytschko, J. Mech. Phys. Solids 50, 1941 (2002).
- 3) M. Arroyo and T. Belytschko, International Journal for Numerical Methods in Engineering 59, 419 (2004)
- 4) 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
- 5) D. W. Brenner, Phys. Rev. B 42, (1990) 9458-9471
- 6) S.J. Stuart, A.B. Tutein and J.A. Harrison: Journal of Chemical Physics, 112(2000), pp. 6472-6486