

多層カーボンナノチューブの曲げ挙動における後座屈挙動の解析

Analysis on post-buckling behavior for Multi-Walled Carbon Nanotubes under Bending

北海道大学大学院工学院

○学生員

石渡裕太

(Yuta Ishiwata)

北海道大学工学部

学生員

小池育代

(Ikuyo Koike)

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。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。

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近傍点における挙動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。また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)¹⁾ との比較を行った。

2. 解析モデル

Figure.1 は CNT (厚さ t , 長さ L , 半径 a) 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ある一定の曲率 C を生じ、最終的に崩壊へと至る。

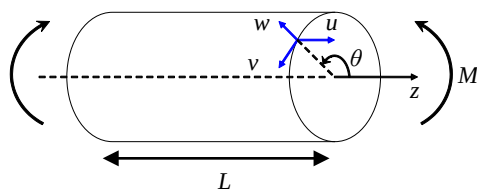


Figure.1 解析対象とする円筒シェル構造

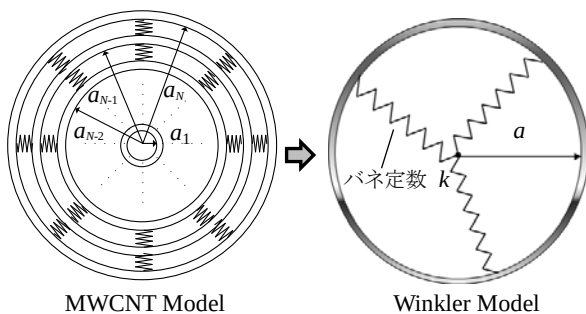


Figure.2 解析モデルの断面図

Figure.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 der Waals (vdW) 力が働き、互いに影響を与え合う。ここでは内層を Winkler バネとしてモデル化した定式化を行う。

3. 現象の定式化

任意の位置 (a, θ, z) の半径、円周、軸方向の変位をそれぞれ w, v, u とすると、以下のように表せる。

$$\begin{aligned} w &= w_0 + w_1 \\ v &= v_0 + v_1 \\ u &= u_0 + u_1 \end{aligned} \quad (1)$$

上式の添え字 0 は安定つり合い状態の変位、1 は座屈変位を表す。今までの研究の知見より考え得る変位は、変位の振幅成分 S_i を用いて以下のように表せる。

$$\begin{aligned} w &= w_1 = \left[S_1 + S_2 \cos \left(\theta - \frac{\pi}{2} \right) + S_3 \cos 2\theta \right] \sin \frac{n\pi}{L} z \\ v &= 0 \end{aligned} \quad (2)$$

$$u = u_0 = Ca \left(z - \frac{L}{2} \right) \sin \theta$$

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。また、後座屈を考える上で仮想変位 δ を半径方向に与えると以下のように表せる。

$$w_1 = \delta \left[S_1 + S_2 \cos \left(\theta - \frac{\pi}{2} \right) + S_3 \cos 2\theta \right] \sin \frac{n\pi}{L} z \quad (3)$$

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(4)²⁾、式(5)になる。ただし、微分記号 $'$ は式(4)では θ による微分、式(5)では z による微分を表す。

$$\begin{aligned} U_\theta &= \frac{1}{2} \int_0^L \int_0^{2\pi} \left[Et \left\{ \frac{v' + w}{a} + \frac{1}{2} \left(\frac{v - w'}{a} \right)^2 \right\}^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{Et^3}{12} \left(\frac{v' - w''}{a^2} \right)^2 \right] a d\theta dz \end{aligned} \quad (4)$$

$$U_z = \frac{1}{2} \int_0^L \int_0^{2\pi} \left[Et \left(u' + \frac{1}{2} w'^2 + \frac{1}{2} v'^2 \right) + \frac{Et^3}{12} w''^2 \right] a d\theta dz \quad (5)$$

バネによるひずみエネルギーはバネ定数 k を用いて以下のように表す。

$$U_k = \frac{1}{2} \int_0^L \int_0^{2\pi} k \cdot w^2 d\theta dz \quad (6)$$

ひずみエネルギーの総和をポテンシャルエネルギー Π とすると、 Π は以下のように δ と C の関数として表すことができる。

$$\Pi = U_{\theta} + U_z + U_k = \Pi(C, \delta) \quad (7)$$

Π の δ に関する一階微分をとって0とおくと、分岐点近傍の座屈平衡状態を決定することができる³⁾。

$$\frac{d\Pi}{d\delta} = f(\delta) + f(\delta^2) + f(\delta^3) = 0 \quad (8)$$

式(8)を解くことで δ に関する3つの解が得られる。

4. 解析結果

MWCNT ModelをWinkler Modelで近似した場合の層数-バネ定数関係を示したものがFigure.3 である。内径を $a_1=8.5\text{nm}$, $a_1=6.0\text{nm}$, $a_1=3.5\text{nm}$ と固定し、バネ定数の違いをプロットした。半径が小さい時はバネ定数の影響が大きいことがわかった。

Figure.4 はWinkler ModelとCGC Modelにおける座屈曲率を比較した図である。縦軸の座屈曲率は $C_{cr}a$ と無次元化したものである。Winkler Modelの方がやや小さい曲率で座屈を生じるが、傾向は概ね一致していると言える。

Figure.5 は縦軸にエネルギーを、横軸に曲率をそれぞれ対数軸でプロットしたグラフである。グラフが屈折している点が座屈点であり、Figure.4の座屈曲率と対応している。解析諸元はTable.1に示す通りである。ここで α , β , γ はエネルギー変化の傾きである。特に座屈前後の傾きの変化に着目すると、座屈する前の安定つり合い状態では傾きが2でエネルギー増加するのに対し、座屈後はいずれも $\alpha \approx 1.41$ という傾きが得られた。この結果はCGC Modelの $\gamma=1.42$ という結果¹⁾と比較しても大変高い精度で再現できたと言える。

5. まとめ

本研究を通し、MWCNTが曲げを受けたときに座屈を生じ、座屈後のエネルギー挙動を評価する解析手法を示すことが出来た。また、他の検証結果と比較してみても高精度の再現性があると言える。今後の課題としては、座屈後の挙動および Local bucklingの詳細な議論、ねじりや等圧荷重等が加わった複合的な外力条件のもとでの解析を予定している。

謝辞

本研究に際し、カタルーニャ工科大学 Marino Arroyo 准教授、山梨大学・島弘幸准教授よりデータ提供および助言をいただきました。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、関係各位に御礼申し上げます。

参考文献

- 1) Arias I and Arroyo M: Size-dependent nonlinear elastic scaling of multiwalled carbon nanotubes. Physical Review Letters, Vol.100,085503,2008
- 2) B.O. Bruth and B.O.Almroth: Buckling of Bars, Plates and Shells, McGraw-Hill, 1975
- 3) 川井忠彦, 藤谷義信: 座屈問題解析 培風館(1980)

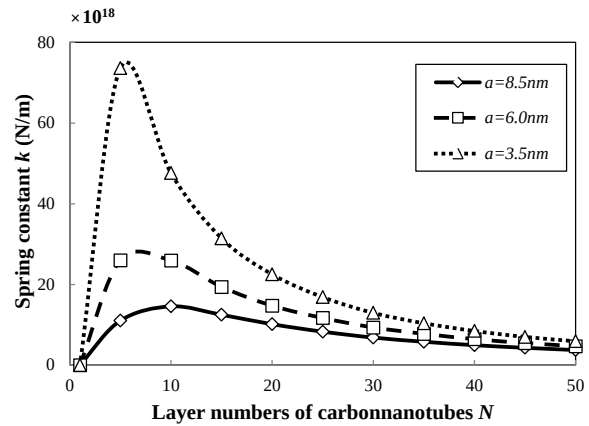


Figure.3 対応するバネ定数 k
($L=102\text{nm}$, $E=3.84\text{Tpa}$, $d=0.34\text{nm}$, $t=0.09\text{nm}$)

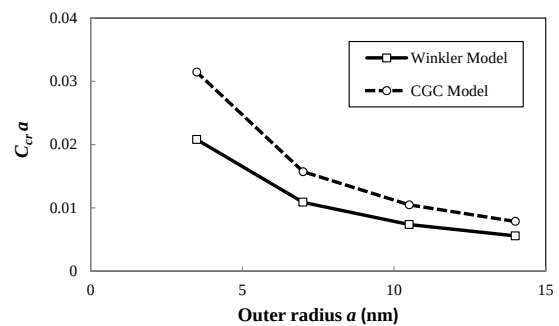


Figure.4 Winkler Model と CGC Model の曲率比較

Table.1 解析諸元と α 値

	a (nm)	k (N/m)	L (nm)	α
10-walled	3.5	13.13×10^{18}	120	1.4062
20-walled	7	4.24×10^{18}	240	1.4072
30-walled	10.5	2.038×10^{18}	360	1.4085
40-walled	14	1.19×10^{18}	480	1.4093

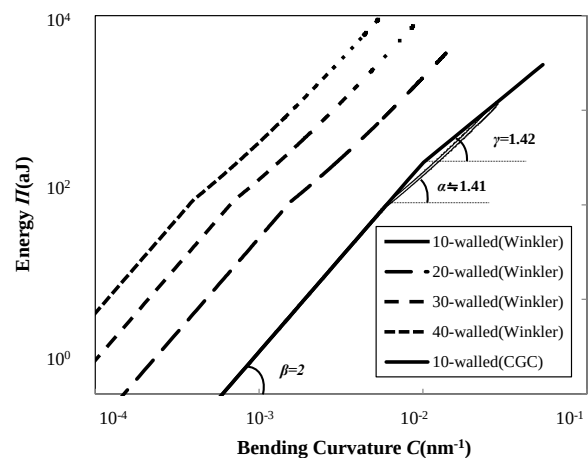


Figure.5 座屈前後のエネルギー挙動