

曲げを受ける多層カーボンナノチューブの座屈挙動における サイズ依存性の理論的検証

Size-dependence of Buckling Behaviours in Multi-Walled Carbon Nanotubes under Pure Bending

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研究院

○学生員

学生員

正 員

石上 一翔 (Kazusa Ishigami)

池岡 直哉 (Naoya Ikeoka)

佐藤 太裕 (Motohiro Sato)

1. はじめに

カーボンナノチューブ(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・熱伝導性を併せ持つ特異な次世代ナノ材料として世界的注目を集めている。中でも多層カーボンナノチューブ(Multi-Walled Carbon Nanotubes, 以下 MWCNTs)は外圧作用により特異な変形性状を有することが多くの研究により明らかにされているが、曲げを受ける際には圧縮側に Ripple と呼ばれる波状のしわが生じ、ある程度の大変形に対しても弾性的挙動をすることが知られている。本研究では、純曲げを受ける MWCNT に焦点を当て、座屈近傍点における挙動について、曲げ座屈特有の「サイズ依存性」の観点から理論的な検証を行うことを目的とした。

2. 解析モデル

図-1 は CNT (厚さ t , 長さ L , 直径 D) 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 を生じながら変形が進行する。

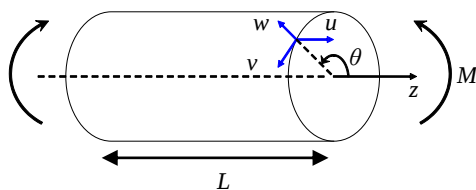


図-1 解析対象とする円筒シェル構造

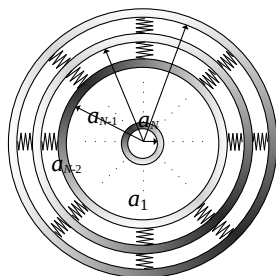


図-2 解析モデルの断面図

図-2 は N 層目における半径を $a_n (=Dn/2)$ とし、MWCNTs(層数 N , 層間距離 d)の断面を示したものである。ここでは内層を、各層間に van del Waals(vdW)力が

働き、互いに影響を与え合う 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

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。

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

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

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す²⁾。

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

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。

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

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

また, 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。

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

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。

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

座屈時に断面に生じる曲げモーメント M_{cr} は、

$$M_{cr} = EC_{cr} \sum_{i=1}^N \pi r_i^3 t \quad (9)$$

結果を評価するパラメータとして曲率に最外層半径の2乗をかけた C^{**} ($=C_{cr} \times r^2$) を用いる。

4. 解析結果

層間距離 $d = 0.3415\text{nm}$ 、ヤング係数 $E = 3.83\text{TPa}$ 、厚さ $t = 0.09\text{nm}$ として解析を行った。

図-3はRippleの波形を図示したもので、左図は全体図、右図は断面図である。チューブ圧縮側に波状のしわが発生しており、設定した変位式で、想定する座屈モード「Ripple」を概ね表現できていると言える。

図-4は層数と C^{**} の関係を最内径の大きさごとにまとめたものである。 $N \geq 20$ において C^{**} がほぼ一致していることが読み取れる。これは、およそ $N \geq 20$ になると、内層の密度が変形を拘束する「詰まったチューブ」になり、曲げの挙動が似通うことを示している。

図-5は曲げモーメントと曲率の関係を層数ごとにまとめたものである。30層から50層までは内径1nmから3.5nmについて0.5nm間隔でプロットし、20層のみ内径4.5nmまで拡張している。20層の右端の内径4.5nmの点と30層の左端の内径1nmの点が一致していることが読み取れる。両者の最外層半径は一致しており、最外径の大きさが M_{cr} と C_{cr} の関係に強く寄与していることを示している。また、各層ごとの M_{cr} - C_{cr} の曲線群を一つの曲線に近似出来ることが読み取れる。

図-6は曲げモーメントとパラメータ C^{**} の関係を層数ごとにまとめ、対数表示化したものである。20層から50層まで、それぞれ同様に内径1nmから3.5nmの範囲でプロットしている。 C_{cr} は図-4において曲線上に分布していたが、 C^{**} の値は層数、内径とそれに対応する限界曲げモーメントに関わらずほぼ一定となることがわかった。

5. まとめ

本研究を通し、以下の知見が得られた。

・およそ20層より多層のCNTsは「詰まったチューブ」といえ、曲げに対する挙動がおおよそ一致する。

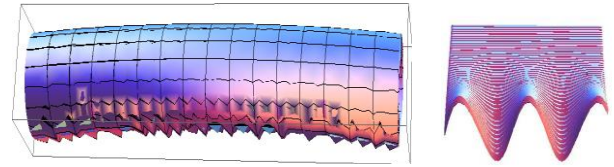


図-3 座屈モード図

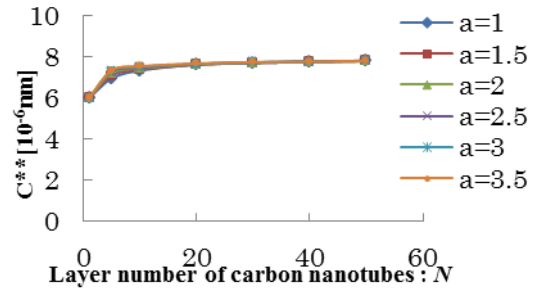


図-4 各最内層半径の層数と C^{**} の変化の比較

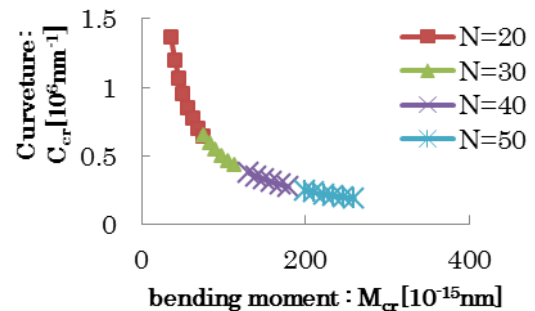


図-5 層数ごとの M_{cr} と C_{cr} の変化の比較

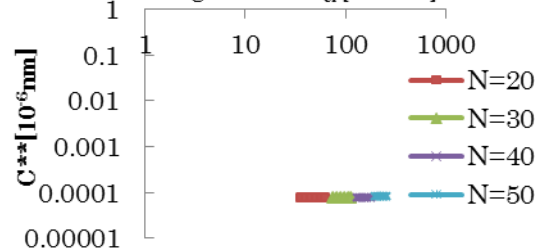


図-6 層数ごとの M_{cr} と C^{**} の変化の比較

・曲率に最外層半径の2乗をかけたパラメータ C^{**} は $N \geq 20$ の CNTs において、層数と内径、曲げモーメントに関わらずほぼ一定値をとる。

謝辞

本研究は科研費基盤研究(B)(研究課題番号：15H04207、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) 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)