

静水圧荷重を受ける単層及び多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 Multi-Walled Carbon Nanotubes

北海道大学工学部	○学生員	谷内湧	(Yu Yachi)
北海道大学大学院工学院	学生員	小池育代	(Ikuyo Koike)
北海道大学大学院工学院	学生員	池岡直哉	(Naoya Ikeoka)
山梨大学大学院総合研究部	非会員	島弘幸	(Hiroyuki Shima)
東京大学生産技術研究所	非会員	梅野宜崇	(Yoshitaka Umeno)
北海道大学大学院工学研究院	正員	佐藤太裕	(Motohiro Sato)

1. まえがき

カーボンナノチューブ(Carbon Nanotubes、以下 CNTs)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。CNTs 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。

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、多層CNTs(Multi-Walled Carbon Nanotubes、以下 MWCNTs)について円筒シェル理論では追うことが不可能な座屈後の大変形を伴う挙動の追跡を試みた。また、静水圧荷重下における単層 CNTs(Single-Walled Carbon Nanotubes、以下 SWCNTs)及び多層 CNTs の合計 9 種類の CNTs について解析を行い、最内層直径や層数が座屈荷重に及ぼす影響について分析するとともに、円筒シェル理論を用いて求めた座屈荷重について比較を行った。

2. 解析モデル

本研究では、ジグザグ型の構造を持つ CNTs を対象とした。また計算の際、CNTs は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た。

2.1 解析 1 MD 法による MWCNTs の大変形を伴う挙動の解析

図-1 は解析対象とする 4 層のカイラルベクトル($m,0$) = (9,0)/(18,0)/(27,0)/(36,0) の CNTs の断面図、図-2 はその側面図、そして図-3 はその俯瞰図である。この MWCNTs について座屈後の大変形を伴う挙動を MD 法を用いて追跡した。

2.2 解析 2 最内層直径が一致する CNTs の座屈荷重の比較

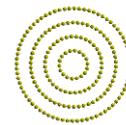


図-1 解析モデル CNTs 断面図



図-2 解析モデル CNTs 側面図

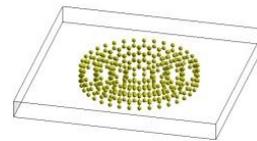


図-3 解析モデル CNTs 俯瞰図

表-1 解析対象 CNTs のカイラルベクトルと断面図

最内層直径 (nm)	層数		
	1 層	2 層	3 層
0.694			
	(9,0)	(9,0)/(18,0)	(9,0)/(18,0)/(27,0)
1.409			
	(18,0)	(18,0)/(27,0)	(18,0)/(27,0)/(36,0)
2.110			
	(27,0)	(27,0)/(36,0)	(27,0)/(36,0)/(45,0)

表-1 は解析対象とする CNTs のカイラルベクトルと断面図を表にまとめたものである。

解析 2 では最内層直径が一致する 1 層から 3 層の CNTs について、MD 法による座屈荷重と円筒シェル理

論により求めた座屈荷重について比較する。

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²⁾。

本研究では、SWCNTs においては CNTs 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³⁾を用いた。そして、MWCNTs においては原子間相互作用ポテンシャルに MWCNTs 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⁴⁾を用いた。

4. 考察

4.1 解析 1 MD 法による MWCNTs の大変形を伴う挙動の解析

図-4 はカイラルベクトル $(m,0) = (9,0)/(18,0)/(27,0)/(36,0)$ の MWCNTs の座屈の変形過程を時系列順に(a)から(d)まで並べたものである。この MWCNTs は波数 $n = 4$ の四角型に座屈変形を起こした後、さらに変形が進み四角型が崩れて最終的にはしずく型にまで大変形が進んだ。これは MWCNTs が座屈したのちに一点に変形が集中したためであると考えられる。また、座屈直後に最内層は円形を保っていたが大変形が進むにつれて最内層も楕円形に変形を起こした。

4.2 解析 2 最内層直径が一致する CNTs の座屈荷重の比較

MD 法による座屈荷重と円筒シェル理論により求めた座屈荷重を最内層直径が一致する CNTs について比較したものが図-5 である。この図より、最内層直径が大きいものほど円筒シェル理論の座屈荷重と近い値が得られることがわかる。また、最内層のカイラルベクトルが $(9,0)$ の CNTs では、層数が多いほど円筒シェル理論の座屈荷重に近い結果が得られることがわかった。

5. まとめ

本研究から以下の知見が得られた。

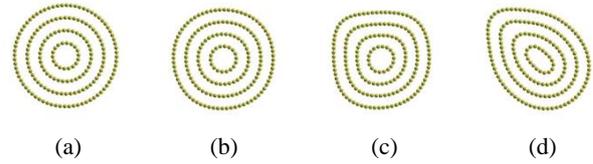


図-4 4層 CNTs の座屈挙動

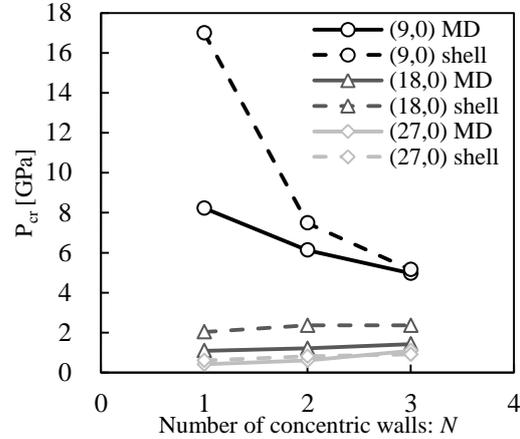


図-5 最内層直径が一致する CNTs の座屈荷重の比較

- 座屈後の大変形時には 4 層 CNTs は波状変形を起こした後にさらに変形が進み、一点に変形が集中してしずく型にまで形状が変化した。また、座屈時には円形を保っていた最内層も楕円形に変形した。
- 最内層直径が一致する CNTs では最内層直径が小さくなるほど座屈荷重が大きくなる。
- 最内層のカイラルベクトルが $(9,0)$ の CNTs において、1 層では円筒シェル理論の座屈荷重とあまり一致しないが、2 層及び 3 層の CNTs では円筒シェル理論と近い値が得られた。

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

- Shima, H. and Sato, M.: Multiple radial corrugations in multiwall carbon nanotubes under pressure, Nanotechnology, Vol.19, 495705, 2008.
- 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
- Brenner, D. W., Shenderova, O. A., Harrison, J. A., Stuart, S.J., Ni, B. and Sinnott: A second-generation reactive empirical bond order (REBO) potential energy expression for hydrocarbons, Journal of Physics Condensed Matter, 14(2002), pp.783-802.
- Stuart, S. J., Tutein, A.B. and Harrison, J. A.: A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions, Journal of Chemical Physics, 112(2000), pp.6472-6486.