

カイラリティの違いがカーボンナノチューブの断面座屈荷重に及ぼす影響

Effects of difference in chirality on cross-sectional buckling load of carbon nanotubes

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
山梨大学大学院総合研究部
東京大学生産技術研究所
北海道大学大学院工学研究院

○学生員
学生員
学生員
非会員
非会員
正員

樋口 諒
谷内 湧
池岡直哉
島 弘幸
梅野宜崇
佐藤太裕

(Ryo Higuchi)
(Yu Yachi)
(Naoya Ikeoka)
(Hiroyuki Shima)
(Yoshitaka Umeno)
(Motohiro Sato)

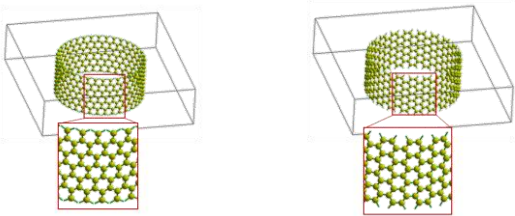
1. まえがき

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 は、軽量かつ高強度、特に軸方向の高い引張強度、しなやかな弾性力を有するという力学的特性、そして熱伝導性や電気的性質を操作することが可能である。この特徴から、スポーツ製品や自動車、集積回路など電子部品内での半導体等、各種工業分野への応用が期待されている。これらの点から、座屈荷重などの力学的性質を把握すること求められるが、CNT はナノレベルの物質であるため、それらを実験で直接観察することは極めて困難である。そのため既存の研究では、線形弾性領域における解析が可能な円筒シェル理論ベースの連続体近似手法を用いて座屈点までの挙動を導出してきた。この手法は簡便であるが、連続体として近似しているため近似誤差が生じる。また、CNT のカイラリティの違いなどについて検証することは不可能であるなどの問題がある。

本研究では、断面解析手法として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 Method, 以下 MD 法)を用いた。静水圧荷重下での単層 CNT (Single-walled Carbon Nanotube, 以下 SWCNT) 及び多層 CNT (Multi-walled Carbon Nanotube, 以下 MWCNT) の座屈挙動を原子レベルで検証した。Armchair タイプと Zigzag タイプの二種類の異なるカイラリティを持つ CNT を用いて座屈荷重の変化、加えて MD 法と円筒シェル理論によって求められた座屈荷重との比較を行った。

2. 解析モデル

本解析では、図-1 のようなカイラルベクトルが $(n, 0)$ と表される Zigzag タイプと (n, n) と表される Armchair タイプの二種類の異なるカイラリティを持つ CNT のうち、直径などの条件が近いものを対象とした。そして、両タイプと条件を合わせたものを円筒シェル理論で計算し、比較を行った。表-1 は解析の対象とした CNT のカイラルベクトルと直径、断面図をまとめたものである。断面変形の挙動を扱うことから CNT は軸方向にのみ周期境界条件を適用することで無限の長さを持たせた。外圧は、最外層にのみ静水圧荷重を載荷し検証を行った。



Zigzag タイプ $(n, 0)$ Armchair タイプ (n, n)
図-1 Zigzag タイプと Armchair タイプの CNT

表-1 解析対象 CNT の断面図とカイラルベクトル

直径 (nm)	層数		
	1 層	2 層	3 層
1.409 (Zigzag)			
	(18,0)	(18,0)/(27,0)	(18,0)/(27,0)/(36,0)
1.490 (Armchair)			
	(11,11)	(11,11)/(16,16)	(11,11)/(16,16)/(21,21)
2.11 (Zigzag)			
	(27,0)	(27,0)/(36,0)	(27,0)/(36,0)/(45,0)
2.170 (Armchair)			
	(16,16)	(16,16)/(21,21)	(16,16)/(21,21)/(26,26)

まず、これらの CNT で最内層直径がほぼ一致するものを比較対象とし MD 法で求めた座屈荷重と円筒シェル理論による座屈荷重の層数による変化を比較した。

次に、SWCNT の直径による座屈荷重の変化についても比較を行った。

3. 解析手法

本研究では、MD 法という原子シミュレーションのひとつ、原子の運動を追跡することで物質の特性を評価する方法を用いる。MD 法では、原子をニュートン力学に従う質点系として扱う。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運動方程式を立てる。

三次元空間では、 $3N$ 個の連立二階常微分方程式となる。この式は解析的に解けないため、数値積分を行う¹⁾。

そこで、本研究では原子間の相互作用を規定するポテンシャル関数として共有結合と非共有結合との結合変化についても評価可能な次式の AIREBO ポテンシャル²⁾を用いる。

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \left[E_{ij}^{REBO} + E_{ij}^{LJ} + \sum_{k \neq i, j \neq i, j, k} E_{kijl}^{tors} \right] \quad (1)$$

式(1)の各項は、 E_{ij}^{REBO} が Brenner らの REBO ポテンシャルで炭素原子同士の共有結合に関する項である。また、 E_{ij}^{LJ} は非共有結合を示す LJ ポテンシャルで、MWCNT の各層の間に働く分子間力（ファンデルワールス力）を示す項である。最後に、 E_{kijl}^{tors} は隣り合った3つの炭素原子が形成する面どうしがなす2面角に依存する torsion ポテンシャルである。

4. 考察

図-2 は最内層のカイラルベクトルが(18,0)、(11,11)である CNT、また図-3 は(27,0)、(16,16)である CNT の座屈荷重を層数について MD 法と円筒シェル理論で得られた結果を比較したものである。図-2、図-3 でともに、層数が増えるごとに MD 法と円筒シェル理論の座屈荷重の差が大きくなっている。これは、層数が増えるごとに円筒への近似誤差と層間に働くファンデルワールス力の近似誤差が蓄積していくことによって座屈荷重の差が大きくなっていくと考えられるが、いずれも誤差は小さく収まっている。

次に、図-4 は SWCNT の MD 法と円筒シェル理論における直径と座屈荷重の関係を比較したものである。この図においては両タイプともに MD 法と円筒シェル理論の結果がほぼ一致しているが、直径が小さくなるほどわずかに近似精度が落ちていることがわかる。これは、直径が小さくなるほど原子数が少なくなることで断面の円形近似精度が低下するためと考えられる。しかし、両タイプともに誤差は小さく収まっている。

図-2 から図-4 より直径の差などにより少しの差は生じているが、似た値や傾向であるため座屈荷重はカイラリティに関係なく直径で決まると考えられる。

5. まとめ

本研究から以下の知見が得られた。

- ・ 座屈荷重はカイラリティに関係なく直径で決まる。
- ・ 円筒シェル理論では層数が多くなるほど近似誤差が蓄積し、直径が小さくなるほどわずかな円筒近似誤差が生じるが、ともに誤差は小さく収まっている。

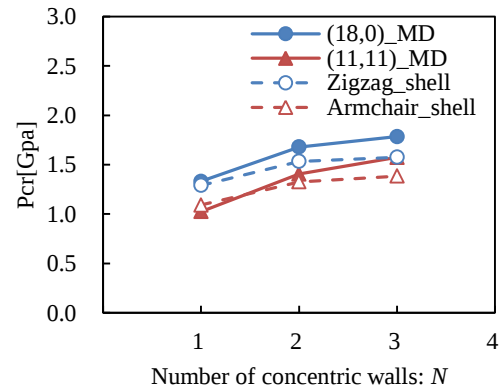


図-2 異なる層数における座屈荷重比較

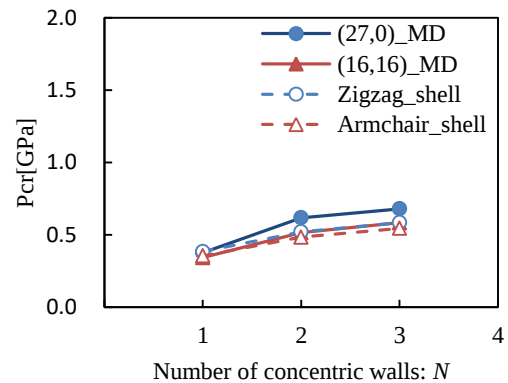


図-3 異なる層数における座屈荷重比較

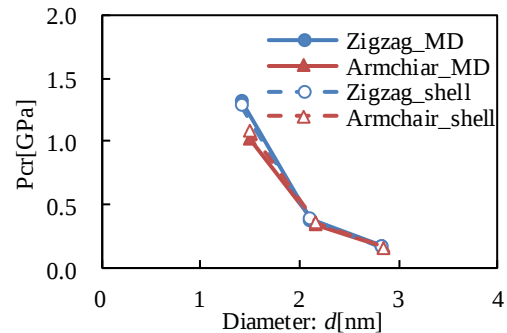


図-4 SWCNT の直径による座屈荷重比較

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) 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, ISBN 4-254-12069-9 C304, 1992
- 2) Stuart, S. J., Tutein, A.B. and Harrison, J. A.: A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions, Journal of Chemical Physics, 112, pp.6472-6486, 2000.