

Stone-Wales 欠陥を有した単層カーボンナノチューブの 静水圧荷重下における座屈挙動解析

Analysis of hydrostatically-pressurized buckling of Single-Walled Carbon Nanotubes with Stone-Wales defects

北海道大学工学部	○学生員	鎌田 弥成	(Minari Kamata)
北海道大学大学院工学院	学生員	谷内 湧	(Yu Yachi)
北海道大学大学院工学院	非会員	石上一 翔	(Kazuto Ishigami)
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 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¹⁾。CNT の特徴は、軽量かつ高強度、しなやかな弾性力という力学的特性に加え、高熱伝導特性や高電流密度耐性を有する点である。これらの特徴から、集積回路などの電子部品内の半導体や、ハイパービルディング、航空機等の複合材など、各種工業分野への応用が期待されている。そのため、CNT の座屈荷重等の力学的性質を明らかにすることが求められるが、CNT の円筒断面はナノサイズであるため、実験で直接観察することは極めて困難である。

また、工業的に生産される CNT は構造的な欠陥を有することが多い²⁾。しかしながら欠陥を有する CNT の断面変形挙動を追跡した例は少なく、各種工業分野へ CNT を活用するためにはこれについて知見を得ることが求められる。

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欠陥を有する CNT の解析も可能にする分子動力学法(Molecular Dynamics Method、以下 MD 法)を用いて、静水圧荷重下での欠陥を有する単層 CNT(Single-walled Carbon Nanotube、以下 SWCNT)の座屈荷重を求め、欠陥の個数が座屈荷重に与える影響を検証した。

2. 解析モデル

本研究では、カイラルベクトルが (n, n) と表される Armchair タイプの SWCNT を解析対象とした。断面変形挙動を扱うことから軸方向にのみ周期境界条件³⁾を適用し、CNT 表層の法線方向に静水圧荷重を載荷した。図-1は解析対象とする CNT の一例、表-1は解析対象である $(n, n)=(18,18), (24,24), (30,30)$ の各 CNT の直径 d の値である。これらの CNT それぞれに Stone-Wales 欠陥(以下 SW 欠陥)を導入し、MD 法を用いて座屈荷重を求めた。

SW 欠陥とは、図-2(a)に示すような、六員環を構成する炭素結合の一つが 90° 回転することにより、図-2(b)のように4つの六員環が2つの五員環と2つの七員

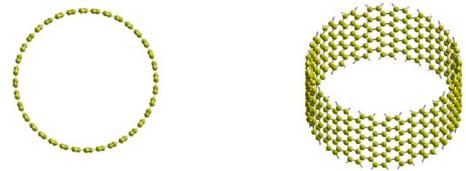


図-1 解析モデル CNT

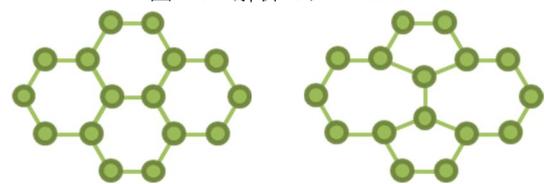


図-2 炭素結合の模式図



図-3 欠陥の均等配置の例

表-1 解析対象 CNT の直径の値

カイラルベクトル (n, n)	直径 d (nm)
(18,18)	2.441
(24,24)	3.255
(30,30)	4.069

環となるものである。本研究では、CNT 断面の円周上に等間隔に SW 欠陥を配置した(ただし、全周に欠陥を配置した場合、五員環と八員環からなる構造となり、本研究ではこのような構造の CNT も可一隻対象としている)。さらに、図-3のように欠陥の個数を変えながら、それぞれについて MD 法による解析を行った。

3. 解析手法

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。よってこの式は解析的には解けないため、数値積分を行う。

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考慮できる AIREBO ポテンシャル⁴⁾を用いた。

AIREBO ポテンシャルは次式で表される。

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

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、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_{ijkl}^{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. 結果と考察

図-4 は無次元化した座屈荷重と無次元化した欠陥間隔との関係である。縦軸の無次元化した座屈荷重とは、解析で得られた座屈荷重を同カイラルベクトルの欠陥のない CNT の座屈荷重で除した値で、欠陥のない CNT に対する欠陥を有する CNT の座屈荷重の比を表している。一方、横軸の無次元化した欠陥間隔は欠陥間隔を円周で除した値であり、欠陥の個数を増やすとこの値は減少する。対象の CNT の円周、欠陥間隔は表-1 の直径の値を用いて求めた。また、グラフ上の各点の数字は欠陥の個数を表している。

図-4 からどのカイラルベクトルの CNT に対しても、欠陥間隔が減少すると座屈荷重が増加する傾向にあることが分かる。マクロの構造物において、構造的欠陥を多く含むほど座屈強度が低下することは一般的に知られているが、本研究ではミクロスケールの物質については構造欠陥が多くなるほど座屈強度は上昇するというマクロの物質でみられる挙動とは相反する結果が得られた。ここで、図-5 は静水圧荷重を受ける欠陥を有する CNT の座屈前の側面図、図-6 は欠陥を有する CNT の載荷前の断面図である。図-5 では欠陥を含む円周でくびれた変形がみられる。また、図-6 からは欠陥部分を頂点とした多角形のような形状になっていることがわかる。本研究結果の原因としては、これらの変形による強度の増加などが考えられる。

5. まとめ

本研究から、欠陥間隔が減少する、即ち欠陥の個数が増加するほど座屈荷重は上昇するという知見を得た。これはマクロの物質では見られない挙動である。今後は CNT の径をさらに大きくした場合や、欠陥の種類を変えた場合にも同様の傾向がみられるかについても検証していきたい。

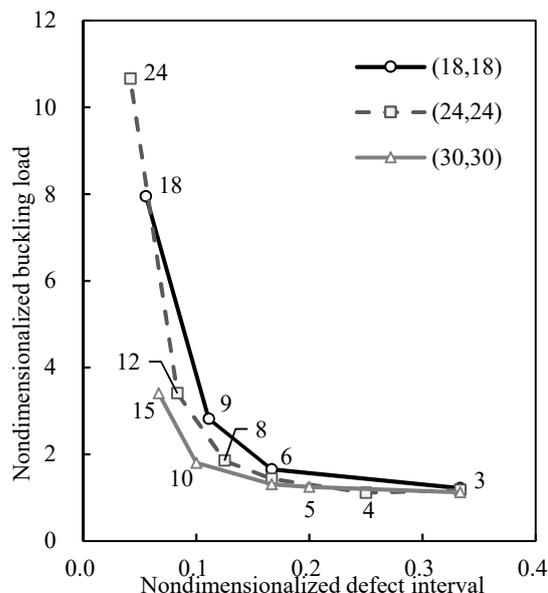


図-4 無次元化した座屈荷重と欠陥間隔 (数字は欠陥の個数)

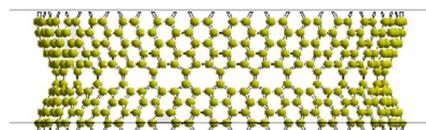


図-5 欠陥を有する(24,24)CNT(欠陥24個)の側面図



(a)欠陥3個 (b)欠陥4個 (c)欠陥6個

図-6 (24,24)CNT 断面の初期不整

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)、基盤研究(B)(研究課題番号: 15H03888、研究代表者: 梅野宜崇)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) Iijima, S.: Helical microtubes of graphitic carbon, *Nature*, 354, pp.56-58, 1991.
- 2) 齋藤理一郎, 篠原久典: カーボンナノチューブの基礎と応用, 培風館, pp.150, 2004.
- 3) 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-, 朝倉書房, pp.10-11, 1992.
- 4) 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.