

夏木俊明

目的別テーマ：ハイパフォーマンス/ハイブリッド繊維合体の開発

研究テーマ

18-5-32：静水圧における CNT の力学特性

ABSTRACT

Carbon nanotubes (CNTs) have been the subject of intense research due to their exceptional mechanical, thermal and electrical properties. It is very important to understand the mechanical properties such as hydrostatic pressure for a given application. In the experiment, it is remarkably difficult to directly measure the mechanical property of individual CNTs due their extremely small size.

In this study, we present a theoretical study on the mechanical properties of CNTs under hydrostatic pressure based on the elastic continuum analysis. The mechanical such as tensile stress and bulk modulus are investigated as a function of nanotube diameter.

研究目的

カーボンナノチューブ (CNT) の直径はわずか数 nm であり、力学特性などを実験的に評価することは容易ではない。実測値の誤差およびばらつきが大きく、とくに CNT の構造がその力学特性に与える影響を把握することは極めて困難である。工学分野において用いられる条件の 1 つとして、静水圧がある。空洞を持つ CNT 構造から、任意の静水圧下で、パイプの変形や座屈などを引き起こすので、力学特性を把握する必要がある。本研究では、静水圧における CNT の力学特性の確立を目的とする。

1 年間の研究内容と成果 (平成 18 年 4 月～19 年 3 月)

力場における分子系のポテンシャル・エネルギーは結合距離、結合角度、van der Waals ポテンシャルなどの独立したポテンシャル・エネルギーの合計になる。本研究では、原子ベースの連続モデルを提案し、静水圧力を受ける CNT の力学特性解析を行った。

図1のように、分子力場で、van der Waals 力は非常に小さいので、分子系のポテンシャル・エネルギーは結合距離と結合角度に対するポテンシャルのみと考えられ、以下のように表される。

$$E^m = \frac{1}{2} \sum_i K_i^r (\Delta b_i)^2 + \frac{1}{2} \sum_j K_j^\theta (\Delta \theta_j)^2 \quad (1)$$

ここで、 K^r と K^θ はそれぞれ結合距離と結合角度の定数である。

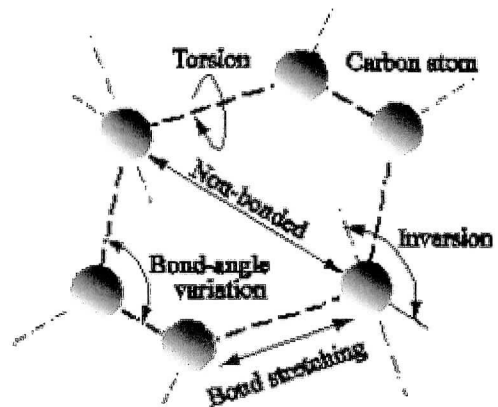


Fig.1 Energy terms of a hexagonal cell

本研究で提案したモデルにより、静水圧における CNT の体積弾性率と CNT 直径の関係を図 2 に示す。単層 CNT の直径は大体 0.7~2.5nm 程度であり、直径が 1.4nm である場合、体積弾性率は 0.2TPa となる。CNT は非常に高い静水圧特性を有することが分かった。CNT の直径の増加に伴い、体積弾性率が小さくなる傾向が見られた。図 3 には、静水圧 1 GPa である CNT の圧縮ひずみと CNT 直径の関係を示す。単層 CNT チューブに対して、圧縮ひずみと直径は線形の関係を示している。2 層 CNT では、外層パイプは内側層より大きい変形ひずみが生じることが分かった。CNT 直径の増加に伴い、外側と内側層のひずみ変形が同じになる。この原因はそのチューブ層の間では、van der Waals の作用であると考えられる。直径が大きい 2 層 CNT の場合には、内側層パイプの働きが大きくなる。

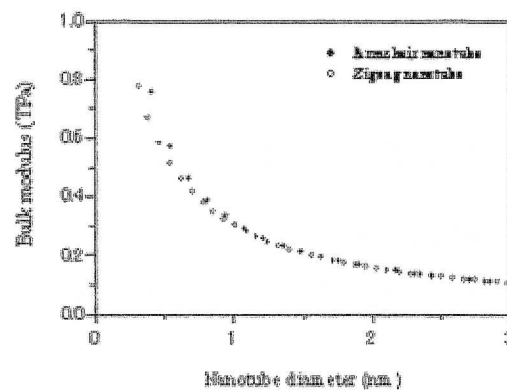


Fig. 2 Variation of the bulk modulus with the nanotube diameter

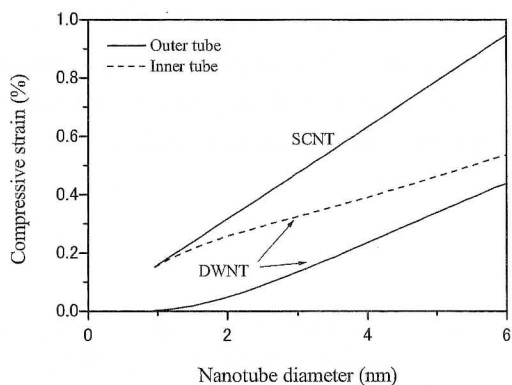


Fig. 3 The compressive strains in single- and double-walled nanotubes as a function of tube diameter