

## 112 カーボンナノチューブの変形に関する基礎的研究

## Fundamental Research on Deformation of a Carbon Nanotube

○正 石原 正行 (静大工) 正 野田 直剛 (静大工)

Masayuki ISHIHARA, Shizuoka University, Johoku 3-5-1, Hamamatsu  
Naotake NODA, Shizuoka University, Johoku 3-5-1, Hamamatsu

Deformation of a carbon nanotube is studied by an analytical method. A single-walled carbon nanotube is regarded as a beam with a hollow cylindrical cross section. Deformation is analyzed by the beam theory introducing the von Kármán strains to describe large deformation. As an illustrative example, the tube subjected to an axial compressive load and simply-supported at both edges is treated assuming a carbon nanotube attached to a probe of an atomic force microscope. The solution of first mode deflection is obtained explicitly. Numerical examples are presented to show the relation between the axial load and the large deflection.

**Key Words:** Carbon Nanotube, Large Deformation, Beam, von Kármán strain

## 1. 緒言

カーボンナノチューブ(CNT)とは、グラファイトシートを数 nm～数十 nm 程度の円筒状に巻いた形状の炭素構造物である。1991年に発見<sup>(1)</sup>されて以来、その微小さや並外れた機械的・電気的特性で注目を浴び、世界各国でさかんな勢いで研究されている。応用例としては、電界放出ディスプレイの電子源<sup>(2)</sup>、MOSFET 電極<sup>(3)</sup>、ナノピンセット<sup>(4)</sup>、強化繊維<sup>(5)</sup>と多岐に渡っている。

力学的観点からの研究では、変形特性の解析<sup>(6),(7),(8),(9)</sup>が行われている。CNTの応用においては変形特性の支配因子を明確にする必要があることから、連続体として解析される場合<sup>(7),(8),(9)</sup>がある。ところが、それらの解析例は、実際に観察される例<sup>(5)</sup>とは異なり、微小変形という仮定にもとづいている。

そこで、本研究では、CNTの大変形を理論的に解析した。単層CNTを中空円柱としてモデル化し、その変形をはりの理論を用いて解析した。その際、大変形を考慮するため、von Kármán ひずみを導入した。具体例として、原子間力顕微鏡(AFM)の探針カンチレバー先端に取り付けられたCNTを想定し、軸圧縮力を受け、両端単純支持されたCNTを取り扱い、その大たわみの理論解を得た。さらに数値計算を実行し、軸圧縮力と大たわみの関係を定量的に評価した。

## 2. 理論解析

## 2.1 モデル化

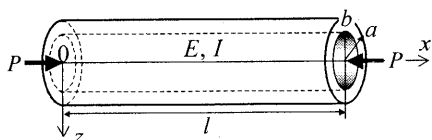


Fig.1 Analytical model

単層CNTの解析モデルとして、Fig.1に示すような長さ $l$ 、外径 $a$ 、内径 $b$ 、ヤング率 $E$ 、断面2次モーメント $I$  ( $\equiv (a^4 - b^4)/4$ )の、中空円柱断面のはりを考える。はりとは両端で単純支持され、軸圧縮力 $P$ が作用しているものとする。

## 2.2 基礎方程式

Fig.1のはりでモデル化されたCNTの大変形を、はりの曲げ理論に von Kármán ひずみを導入して解析する。 $x$ 、 $z$ 方向の変位成分をそれぞれ $u$ 、 $w$ とし、von Kármán ひずみを導入

すると、面内ひずみ ( $x$ 方向の垂直ひずみ)  $\varepsilon_0$ 、曲率半径は  $\rho$  は次式で表わされる。

$$\varepsilon_0 = \frac{du}{dx} + \frac{1}{2} \left( \frac{dw}{dx} \right)^2, \quad \frac{1}{\rho} = -\frac{d^2w}{dx^2} \quad (1)$$

ここで、CNTに作用する軸力を $N$ 、せん断力を $F$ 、曲げモーメントを $M$ とすると、これらと面内ひずみ・曲率半径との関係は次式で与えられる。

$$N = EA\varepsilon_0, \quad M = EI \frac{1}{\rho} \quad (2)$$

ただし、 $A(\equiv \pi(a^2 - b^2))$ はCNTの見かけの断面積である。軸力の影響を考慮すると、 $z$ 方向の力つりあいは次式で与えられる。

$$\frac{d^2M}{dx^2} + N \frac{d^2w}{dx^2} = 0 \quad (3)$$

## 2.3 変形解析

式(1)を式(2)に代入すると次式を得る。

$$N = EA \left[ \frac{du}{dx} + \frac{1}{2} \left( \frac{dw}{dx} \right)^2 \right] \quad (4)$$

CNTの変形が微小な場合、式(4)の非線形項は省略でき、 $x$ 方向の力のつりあいより

$$N = -P \quad (5)$$

となることから、変形が微小でない場合の軸力を次のように評価する。

$$N = -P + EA \cdot \frac{1}{l} \int_0^l \frac{1}{2} \left( \frac{dw}{dx} \right)^2 dx \quad (6)$$

ここで、式(1)、(2)、(6)を式(3)に代入すると、たわみ ( $z$ 方向の変位成分)の基礎方程式として、次の常微分方程式を得る。

$$EI \frac{d^4w}{dx^4} + \left[ P - EA \cdot \frac{1}{l} \int_0^l \frac{1}{2} \left( \frac{dw}{dx} \right)^2 dx \right] \frac{d^2w}{dx^2} = 0 \quad (7)$$

また、両端単純支持の境界条件は次式で表わされる。

$$x=0, l: w=0, M=0 \quad (8)$$

CNT の変形が微小な場合、式(7)の積分項は省略でき、式(8)を満たすたわみは

$$w = C \sin\left(\frac{m\pi x}{l}\right); P = \frac{m^2 \pi^2 EI}{l^2} \quad (m=1, 2, \dots) \quad (9)$$

で与えられる ( $C$ は  $x$  によらない定数)。以下では 1 次モード ( $m=1$ ) の大変形を調べるために、たわみ形状を次のように仮定する。

$$w = w_1 \sin\left(\frac{\pi x}{l}\right) \quad (10)$$

ここで、 $w_1$  は CNT の中央 ( $x=l/2$ ) に生じる最大たわみを意味する未定定数である。式(10)を式(7)に代入すると、 $w_1$  に関する方程式

$$w_1 \left[ w_1^2 - \frac{4l^2}{\pi^2 EA} \left( P - \frac{\pi^2 EI}{l^2} \right) \right] = 0 \quad (11)$$

を得る。式(11)の安定解は次のようになる。

$$\left. \begin{aligned} w_1 = 0: & \quad P < \frac{\pi^2 EI}{l^2} \\ w_1 = \frac{2l}{\pi \sqrt{EA}} \sqrt{P - \frac{\pi^2 EI}{l^2}}: & \quad P > \frac{\pi^2 EI}{l^2} \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

上式(12)の第 2 式は、オイラーの座屈荷重を超えて軸圧縮荷重が作用した場合の CNT の最大たわみの理論解である。

さて、CNT を AFM 探針に取り付けて使用する際、CNT の軸方向収縮量を評価することが重要である。CNT の縮みは、軸圧縮とたわみによる収縮の和なので、次のように表わされる。

$$\Delta = \frac{Pl}{EA} + \int_0^l \frac{1}{2} \left( \frac{dw}{dx} \right)^2 dx \quad (13)$$

式(12)を式(13)に代入すると次式を得る。

$$\left. \begin{aligned} \Delta = \frac{l}{EA} P: & \quad P < \frac{\pi^2 EI}{l^2} \\ \Delta = \frac{l}{EA} P + \frac{l}{EA} \left( P - \frac{\pi^2 EI}{l^2} \right): & \quad P > \frac{\pi^2 EI}{l^2} \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

式(14)より、オイラーの座屈荷重を境に、荷重と収縮量の線形特性が変化していることが分かる。

### 3. 数値計算例

数値計算諸元として、次の数値を用いた。

$$E = 1[\text{TPa}], l = 100[\text{nm}], a = 2.17[\text{nm}], b = 1.83[\text{nm}] \quad (15)$$

図 2 は、軸圧縮荷重  $P$  による CNT の最大たわみ  $w_1$  の変化を示す。無負荷の状態からオイラーの座屈荷重まではたわみが生じず、それ以上の荷重が作用すると、軸圧縮荷重  $P$  に関して非線形なたわみが発生することが分かる。

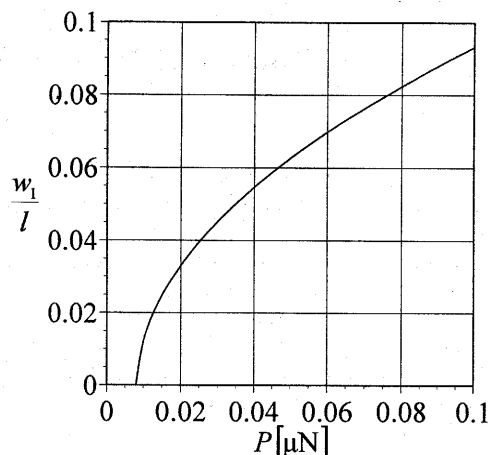


Fig. 2: Variation of deflection with axial load

### 4. 結言

単層 CNT を中空円柱としてモデル化し、その大変形をはりの理論を用いて解析した。具体例として、原子間力顕微鏡 (AFM) の探針カンチレバー先端に取り付けられた CNT を想定し、軸圧縮力を受け、両端単純支持された CNT を取り扱い、その大たわみの理論解を得た。また、軸圧縮力と収縮量の関係を定式化した。さらに数値計算を実行し、軸圧縮力と大たわみの関係を定量的に評価した。

### 参考文献

- (1) Iijima, S.: Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature* 354 (1991) pp. 56-58.
- (2) Bonard, J.-M., Kind, H., Stockli, T., Nilsson, L.-O.: Field emission from carbon nanotubes: the first five years. *Solid-State Electronics* 45 (2001) pp. 893-914.
- (3) Appenzeller, J., Martel, R., Derycke, V., Radosavljevi, M., Wind, S., Neumayer, D., Avouris, P.: Carbon nanotubes as potential building blocks for future nanoelectronics. *Microelectronic Engineering* 64 (2002) pp. 391-397.
- (4) Akita, S., Nakayama, Y.: Nanotweezers consisting of carbon nanotubes operating in an atomic force microscope. *Applied Physics Letters* 79 (2001) pp. 1691-1693.
- (5) Lourie, O., Cox, D.M., Wagner, H.D.: Buckling and Collapse of Embedded Carbon Nanotubes. *Phys. Rev. Lett.* 81 (1998) pp. 1638-1641.
- (6) Chang, T., Gao, H.: Size-dependent elastic properties of a single-walled carbon nanotube via a molecular mechanics model. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 51 (2003) pp. 1059-1074.
- (7) Ru, C.Q.: Axially compressed buckling of a doublewalled carbon nanotube embedded in an elastic medium. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 49 (2001) pp. 1265-1279.
- (8) Wang, G.-W., Zhao, Y.-P., Yang, G.-T.: The stability of a vertical single-walled carbon nanotube under its own weight. *Materials & Design* 25 (2004) pp. 453-457.
- (9) Yoon, J., Ru, C.Q., Mioduchowski, A.: Noncoaxial resonance of an isolated multiwall carbon nanotube. *Phys. Rev., B Condens. Matter* 66 (2002) pp. 233402-1-233402-4.