

分子動力学計算によるカーボンナノチューブ(CNT)の機械的特性評価シミュレーション

環境変化(圧力・温度)に対するナノ材料の変形挙動の解析が可能です

測定法 : 計算科学・AI・データ解析

製品分野 : 燃料電池、ディスプレイ、LSI・メモリ、その他

分析目的 : 形状評価、応力・歪み評価

概要

カーボンナノチューブ(CNT)は軽量で優れた機械的特性(高強度・高弾性)を持ち、様々な用途・環境で使用されています。特に、CNTの変形挙動は柔軟性やエネルギー吸収特性に関連し、センサーやナノデバイス設計において重要です。本資料では、分子動力学計算を用いて単層CNTの曲げ-曲げ戻し変形をシミュレーションした事例を紹介します。シミュレーションによって、環境変化(圧力・温度)による構造変化を原子レベルで観察し、それに伴う歪みエネルギーの変化から変形挙動の解析が可能です。

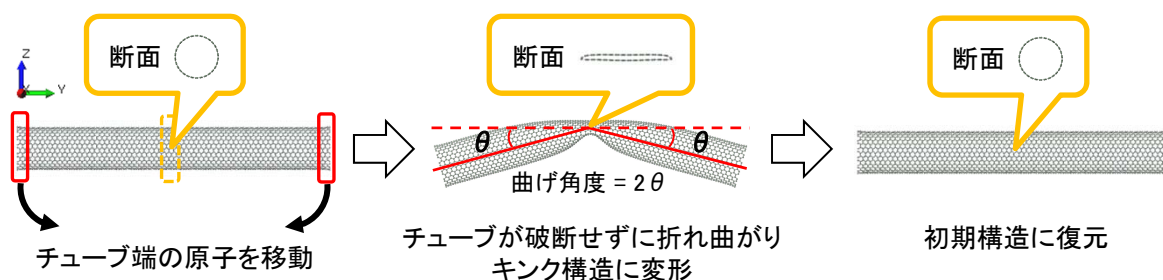
データ

■単層CNTの曲げ-曲げ戻し変形時の構造変化

初期構造 直径 約 2 nm、長さ 約 16 nm
カイラルインデックス (15, 15)

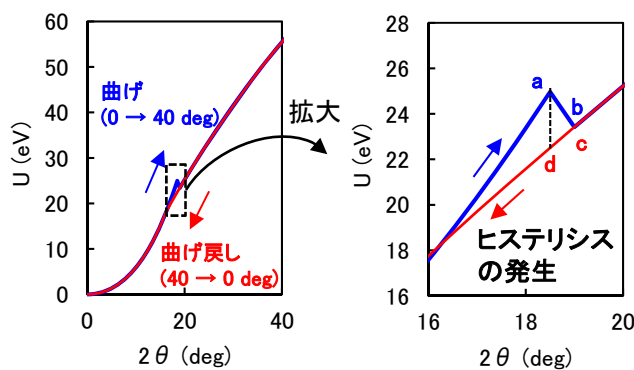
曲げ変形後の構造

曲げ戻し変形後の構造

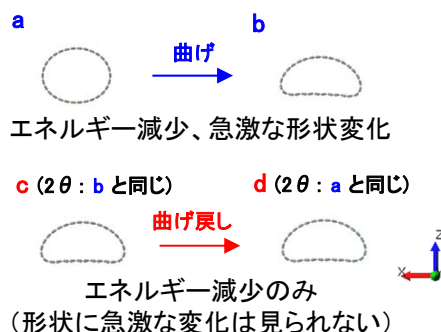


■歪みエネルギーと断面形状の変化

歪みエネルギー $U = (\text{変形後のポテンシャルエネルギー}) - (\text{初期構造のポテンシャルエネルギー})$



ヒステリシス領域における断面形状の変化



【ヒステリシスに関する考察】

ナノチューブの壁同士が互いに引き合うファンデルワールス力によって、曲げた際に一度潰れた壁が元の形に戻りにくくなった。このため曲げ-曲げ戻しで変形挙動に違いが生じ、ヒステリシスが発生した。



✓ 分子動力学計算を用いて、環境変化に対するナノ材料の変形挙動の詳細な解析が可能です

分析サービスで、あなたの研究開発を強力サポート！

一般財団法人
MIST 材料科学技術振興財団

TEL : 03-3749-2525 E-mail : info@mst.or.jp

URL : <https://www.mst.or.jp/>