

高強度 CNT を用いた耐衝撃緩和メカニズムに関する数値研究

Numerical studies on impact resistance mitigation mechanism using high-strength CNT

手島 正吾

一般財団法人 高度情報科学技術研究機構 計算科学技術部

1. 研究目的

CNT(carbon nanotubes)を母材とした耐衝撃緩和材料の開発には、高品質かつ長尺の CNT の合成が不可欠である。我々は非常に速い CNT 成長速度をもつ FCCVD(Floating catalyst chemical vapor deposition)法に着目しているが、合成中に触媒微粒子がガス流に流されて動いているため、CNT 成長過程の原子レベルでの詳細な観察は実験的には難しい。FCCVD 法で生成された CNT においては、2つの触媒微粒子間を CNT がつないだダンベル状の構造が観測されている。このような構造での成長過程を考えると、ガス流によって CNT 両端の触媒微粒子間に速度差が生じると CNT は引っ張り歪みを感じる。この引っ張り歪みを解消するために CNT 成長が進むことで FCCVD において基板上 CVD に比較して速い成長スピードが実現されるのではないかと考え、分子動力学シミュレーションにより成長過程の調査を行った。

2. 研究成果の内容

手法 シミュレーション概要を図1に示す。鉄微粒子と CNT の接合部に注目し、セメントタイト表面上の CNT としてモデル化を行った。引っ張り歪み導入のため、セメントタイトの下部を固定し、CNT の上部は一定速度で引き上げた。引上げ速度は本研究の実験における成長速度より速いものの Motta らにより報告のある 1 mm/s を用いた。シミュレーション中の温度は、開始時点での実験で使用されていた 1000 °C (= 1273 K) を中心に 1073 K、1273 K、1473 K の 3 温度で成長の仕方の比較を行った。CNT のカイラリティによる成長の違いを調べるため、armchair (5,5)、chiral (6,4)、zigzag (9,0) の 3 種類の CNT を用いた。セメントタイトと CNT を同時に扱うため、周辺の原子分布によって種々の構造を取ることができるボンドオーダー型のポテンシャルを用いた。

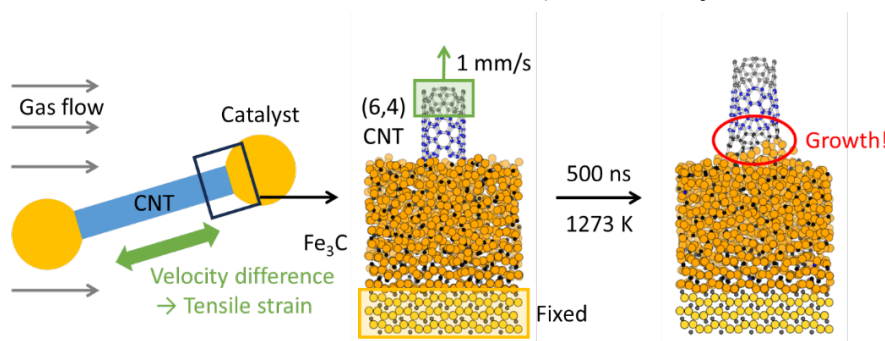


図1：CNT 成長シミュレーションの概要

結果と考察 CNT のカイラリティ (armchair (5,5)、chiral (6,4)、zigzag (9,0))、系の温度 (1073 K、1273 K、1473 K) を変えてシミュレーションを行った結果、CNT 上部の引上げ速度が 1 mm/s と FCCVD 法においても比較的高速であったのにも関わらず、適切な温度では CNT 部分の六員環が増加し、CNT が成長した。シミュレーション中の六員環数変化を図 2 に示す。温度が低い 1073 K ではセメンタイト中の炭素拡散が表面近傍でしか起こらず、炭素の供給が十分でないため CNT がセメンタイト表面から離れ、六員環もほぼ増えなかった。1273 K では融点を超えてセメンタイトはほぼ溶けており、炭素がセメンタイト中を拡散することができるため、CNT への炭素供給が十分行われいずれのカイラリティにおいても六員環が増加した。しかし chiral (6,4) CNT では 500 ns のシミュレーション中六員環が増加し続けるのに対し、armchair、zigzag CNT ではシミュレーションの半分程度の時間で増加が止まっており、Artyukhov らによって報告されている通り、near-armchair である (6,4) CNT が armchair、zigzag CNT よりも成長しやすいというカイラリティによる違いが表れている。純粋な armchair、zigzag 端を持った CNT ではまとまった数の炭素が端に付かなければ CNT が真っすぐ伸びないのに対し、chiral CNT では一時に必要な炭素原子はセメンタイトから最も離れた端の凹部に六員環を構成するための 2~3 個のみであり、これが連続的に起こり斜めに六員環が構成されていくことで CNT が安定して成長することができる (カイラル成長)。温度が高い 1473 K においても CNT は成長するものの、1273 K に比べて欠陥が入りやすい傾向があった。

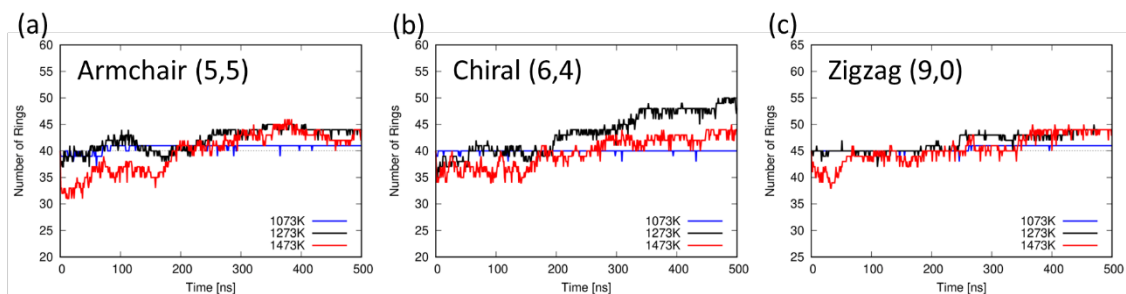


図 2 (a) armchair、(b) chiral、(c) zigzag CNT での六員環数。

まとめ 実験グループにより報告されている高速な CNT 成長過程の解明を目指し、カギと考えられる鉄微粒子間の引っ張り歪みを導入したシミュレーションを行った。結果、1 mm/s という速い成長速度であっても、1273 K、chiral (6,4) CNT では安定して CNT が成長した。1 mm/s の成長に十分な触媒粒子内の炭素拡散のためには融点以上の温度が必要だが、温度が高いと欠陥が入る可能性が高まる。カイラリティも CNT 成長に大きな影響を与え、カイラル成長が起きる chiral (6,4) CNT では速い成長速度で安定して成長した。引っ張り歪み、温度、カイラリティの条件が合致することで、実験で報告されている高速な成長が実現できることを明らかにした。

3. 学際共同利用プログラムが果たした役割と意義

CNT とセメントタイト界面のシミュレーションには系の大規模化および長時間シミュレーションの両立が必須であり、学際共同利用によって初めて実施できる内容である。

4. 今後の展望

カーボンナノチューブの成長メカニズムを分子動力学シミュレーションによって明らかにすることで、高品質かつ長尺の CNT 合成方法の確立へ貢献する。

5. 成果発表

(1) 学術論文

A. Yamanaka, R. Jono, S. Tejima, and J. Fujita, Molecular dynamics simulation of carbon nanotube growth under a tensile strain, *Scientific Reports* **14**, 5625 (2024)

(2) 学会発表

A. Yamanaka, S. Tejima, J. Fujita, Molecular Dynamics Simulation of Carbon Nanotube Growth under Tensile Strain. NT23: The 23rd International Conference on the Science and Applications of Nanotubes and Low-Dimensional Materials, Arcachon, France, Jun 2023 Poster

使用計算機	使用計算機に ○	配分リソース※		
		当初配分	移行*	追加配分
Cygnus	○	20,000		
Pegasus				
Wisteria/BDEC-01				
※配分リソースについてはノード時間積をご記入ください。 *バジェット移行を行った場合、「+2000」「-1000」のように記入				