

MedeAは、第一原理計算や力場計算を基に材料の様々な物性を算出することができます。本稿では、塑性領域における物性予測のため、応力-ひずみ曲線を算出するツールMedeA Deformationについて、カーボンナノチューブへの適用事例を交えて紹介します。

■ MedeA Deformation

MedeA Deformationは、モデル構造の応力-ひずみ関係を計算するツールです。得られる応力-ひずみ曲線から降伏強度、引張強度、破壊強度、せん断強度などが評価できます。与える変形は圧縮、引張、せん断が選択可能です。

MedeA DeformationはFlowchart機能と連携しており、簡単な設定で計算を実行することができます(図1)。応力計算はMedeA LAMMPSとMedeA VASPに対応しており、系のサイズや計算精度によって古典力場と第一原理計算の選択が可能です。

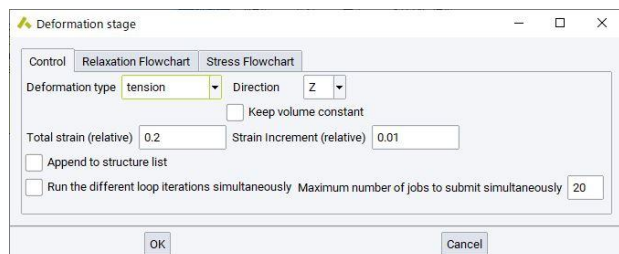


図1. MedeA Deformation設定画面

■ CNTの引張変形

適用例として、カーボンナノチューブ(CNT)の引張変形にMedeA Deformationを適用した事例を紹介します。幾つかのCNTモデルに対して計算を行い、その温度依存性や層の種類、層の数による応力-ひずみ曲線の変化を観察します。

計算に用いたモデル構造を図2に示します。CNTのモデル構造はMedeAに搭載されているNanotube Builder(図3)で構築することができます。

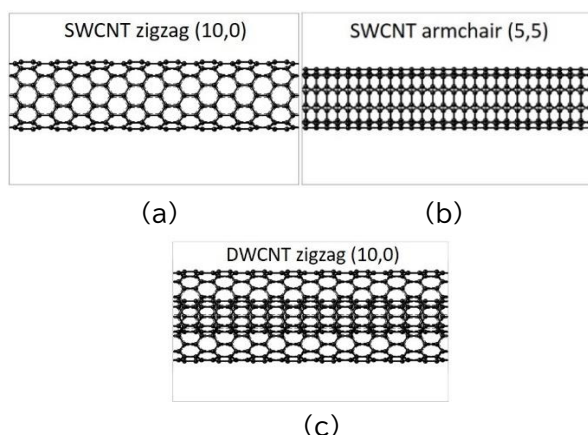


図2. カーボンナノチューブのモデル構造 (a) 単層ジグザグ型(10, 0) (b) 単層アームチェア型(5, 5) (c) 2層ジグザグ型(10, 0)

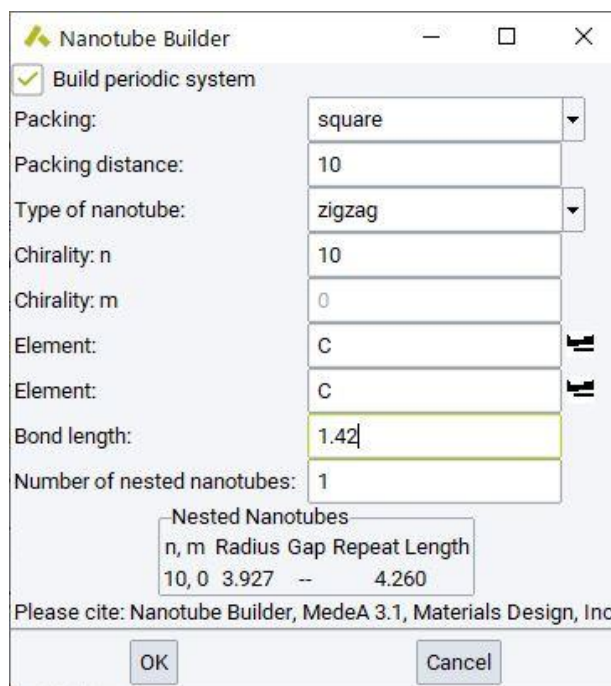


図3. Nanotube Builder 設定画面

まず(a)に示すジグザグ型の単層CNT(SWCNT)

を用い、10 K, 50 K, 100 K, 200 Kそして300 Kにおける応力-ひずみ曲線を求めました。次にCNTのキラリティの違いによる影響を検討するため、(b)のアームチェア型(5, 5)で300 Kにおける計算を行いました。また、層の数を変えて比較するため、(c)2層CNT(DWCNT)のジグザグ型(外層が(10, 0)、内層が(5, 0))でも同様に300 Kでの計算を行いました。引張方向はすべてCNTの繊維伸長方向(図2各図の横方向)です。

本事例では、原子間の相互作用はTersoff力場¹⁾⁻²⁾で表現し、MedeA LAMMPSによるNPT分子動力学計算から各々ひずみを与えた構造の応力を計算しています。

1. 引張強度の温度依存性

ジグザグ型(10, 0)(図2(a))について、10～300 Kの範囲で温度を変化させたときの応力-ひずみ曲線を図4に示します。

ひずみが0.25あたりまではすべての曲線がほぼ重なっています。0.3付近で最大応力点となり、その値は42～45 GPaと大きな違いは見られません。SWCNTの引張強度は13～53 GPaとの報告があります³⁾、計算値はこの範囲内に収まります。

各グラフの違いは破断時のひずみ値に顕著に現れます。温度が低いほど破断時のひずみ値が大きく、温度上昇に伴って小さくなっていきます。温度上昇に伴いC-C振動の振幅が大きくなり、より高い温度ではより早く破断するものと考えられます。

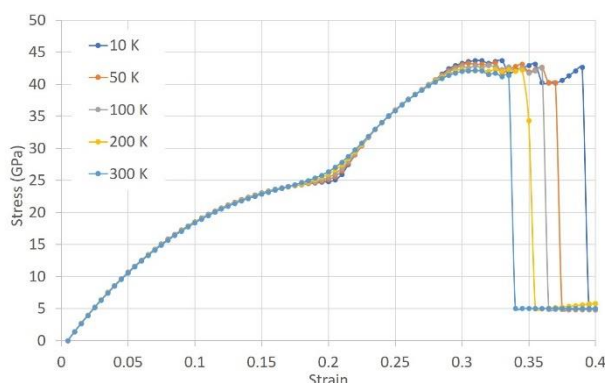


図4. MedeA Deformation で作成した温度による応力-ひずみ曲線の変化

2. CNTのキラリティの違いによる変化

続いてCNTのキラリティの違いによって応力-ひずみ曲線がどのように変化するか見てみましょう。図5に300 Kで計算したジグザグ型(10, 0)(図2(a))およびアームチェア型(5, 5)(同(b))の応力-ひずみ曲線を示します。

最大応力はどちらも42 GPa程と同程度ですが、破断時のひずみ値が大きく異なります。アームチェア型の方がジグザグ型と比べて9%程大きなひずみまで破断せず耐えることになります。これは、ジグザグ型ではひずみ方向に平行なC-C結合が全体の1/3にのぼる一方、アームチェア型では平行なC-C結合が存在せずひずみが分散されるためであると推察されます。

3. 層の数による変化

最後に層の数による応力-ひずみ曲線の違いについて検討します。図6に300 Kで計算した単層ジグザグ型(10, 0)(図2(a))および2層ジグザグ型(10, 0)(同(c))の応力-ひずみ曲線を示します。

まず弾性領域に着目すると、傾きはSWCNTの方がDWCNTのそれと比較して高く、弾性率はSWCNTの方が高いことを示し、実験とその傾向が一致します。

引張強度についてはSWCNTが約42 GPa、DWCNTが約35 GPaと見積もられ、報告されている値³⁾の範囲に収まります。

■ まとめ

MedeA Deformation を用いることで、モデル構造の応力-ひずみ曲線を簡便に求めることができます。本稿ではカーボンナノチューブの様々なモデルを例にとり、応力-ひずみ曲線に対する温度依存性、キラリティによる変化、層の数による変化について考察しました。本稿の例は計算対象が限定的であり、系統的な解析まで至っておりませんが、MedeA LAMMPS による計算は負荷が軽く、1モデルあたり数十分(Intel Xeon Gold6252、24並列)で計算可能であり、多くのモデルに適用可能です。

■ 謝辞

本稿に掲載した計算結果はMaterials Design 社RayShan博士の厚意により提供を受けました(unpublished)。ここに謝意を表します。

- 1) Tersoff, J. *Phys. Rev.*, **1989**, B 39, 5566.
- 2) Tersoff, J. *Phys. Rev.*, **1990**, B 41, 3248.
- 3) <https://www.dojindo.co.jp/letterj/146/review/02.html>