カーボンナノチューブの機械的強度に及ぼす 電子線照射の影響に関する分子シミュレーション(Ⅱ) A Molecular Dynamics Study of Electron Irradiation Effects on Mechanical Strength of Carbon Nanotubes (Ⅱ) 富山高専¹, 大阪府大院工² ^o多田 和広¹, 本田 亮太¹, 地原 由倫², 安田 雅昭², 川田 博昭², 平井義彦² Toyama National Coll. Technol.¹, Osaka Pref. Univ.², [°]Kazuhiro Tada¹, Ryota Honda¹, Yoshinori Chihara², Masaaki Yasuda², Hiroaki Kawata², Yoshihiko Hirai² E-mail: tada@nc-toyama.ac.jp

<u>はじめに</u>電子照射効果を導入した分子動力学シミュレーションを用い,ナノカーボン材料の機械的特性に及ぼす電子照射の影響の解析を行っている[1].今回,電子線照射によって生じる欠陥 がナノカーボン材料の機械的強度に与える影響について原子応力解析を行った結果を報告する. <u>計算モデル</u>電子衝突過程は遮蔽 Rutherford の衝突断面積に基づくモンテカルロ法により分子シ ミュレーションに組み込んだ.電子衝突下での炭素原子の挙動は古典分子動力学法より計算した. <u>解析結果</u>Fig.1 は欠陥の無い単層カーボンナノチューブ(SWNT)の圧縮時の原子応力分布の変 化((a),(b))と中央付近と端付近にある原子に関する応力ひずみ線図((c))である.圧縮中,応力は SWNT 全体に均一にかかっており,降伏点まで弾性的性質を示していることがわかる.Fig.2 は 300K で 5ns 間電子線を照射した SWNTの圧縮時の原子応力分布の変化((a),(b))と中央付近と端付 近にある原子に関する応力ひずみ線図((c))である.Fig.2 (a)より,電子線照射中にできる欠陥によ って残留応力が生じていることがわかる.一方,Fig.2 (b),(c)より,圧縮が進行していくと,欠陥 付近に応力が集中し始めることがわかる.講演では電子線照射条件,欠陥,原子応力及び機械的 強度の関係について詳細を報告する予定である.

<u>謝辞</u>本研究は JSPS 科研費(課題番号 22360145)の助成を受けて行われた. [1] 多田他:第 59 回応用物理学関係連合講演会 講演予稿集 17p-A3-7 (2012).







