

分子動力学計算によるカーボンナノチューブの曲げ変形シミュレーション

ナノ材料に外力を加えた時の形状変化、歪みエネルギーの評価が可能

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

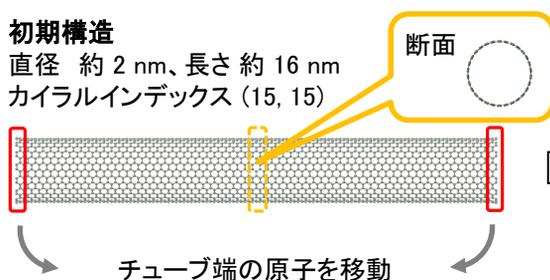
カーボンナノチューブは軽量で高い強度、柔軟性を持ったナノ材料であり、その優れた物性から様々な分野への応用が期待されています。一方で、形状変化に伴う物性の変化も知られており、外力に対する変形や歪みの評価が求められています。本資料では、分子動力学計算を用いて単層カーボンナノチューブの曲げ変形シミュレーションを行った事例を紹介いたします。シミュレーションを行うことで、実測からは評価が難しい原子レベルでの形状変化の観察や歪みエネルギーの算出が可能です。

データ

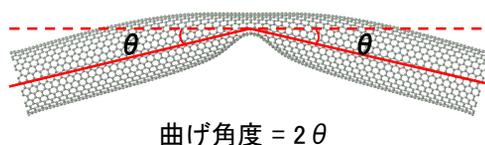
■ 単層カーボンナノチューブの曲げ変形

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)

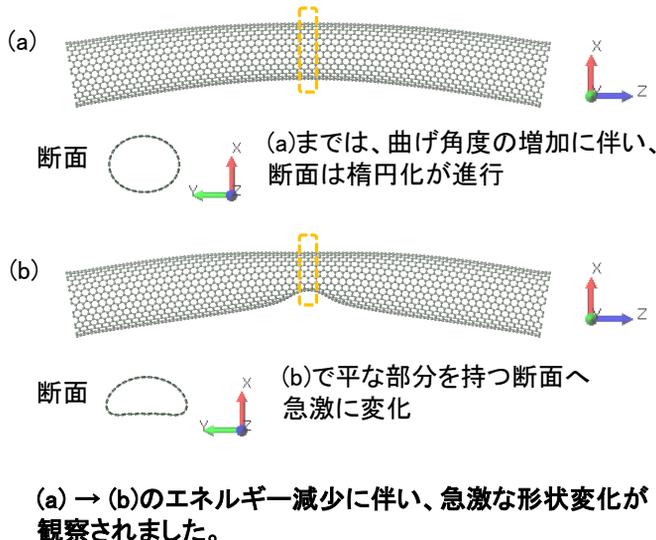
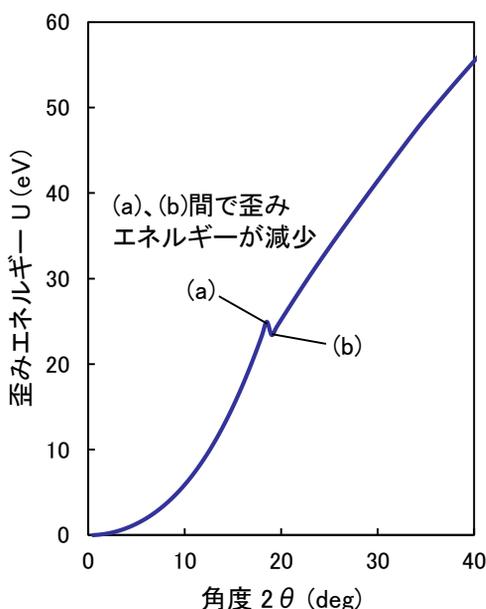


変形後の構造



■ 歪みエネルギーと構造変化

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



✓ 分子動力学計算を用いて、材料に外力を加えた時の形状変化や歪みエネルギーの評価が可能です。

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
MST 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/>