

【補助事業概要の広報資料】

補助事業番号 24-77

補助事業名 平成24年度 カarbon材料の機械的物性計算・評価事業

補助事業者名 愛媛大学 大学院理工学研究科 生産環境工学専攻 教授 岡本伸吾

1 補助事業の概要

(1) 事業の目的

カarbon材料は、軽くて強い、硬い、錆びないなどの優れた機械的特性を有し、ボーイング787など航空機、スポーツ自転車などの輸送機器の構造部材に適用が進んでいる。カarbon材料の基本構造であるダイヤモンドやグラファイトの理想強度は100GPaを超えることが第一原理計算や実験等により知られているが、現実のカarbon材料の強度はその数%しか発現できていない。種々の欠陥を含むカarbon材料のナノレベルの構造と強度の関係を独自に開発した計算コード（分子動力学(MD)シミュレーションの手法）を用いて研究し、高強度を発現するカarbon材料の構造を明らかにする。これにより、カarbon材料の強度が向上できれば、輸送機器へのさらなる適用拡大を図ることができる。昨年度までは、解析ツールを開発し欠陥が強度に与える影響について検討しながらカarbon材料のモデル構築を行ったが、基礎物性について、モデルから得られた計算値は実験値と比較して定量的に問題点があった。今年度は、モデルの精密化を行うと共に、複数の種類の欠陥を含む場合における、強度への影響を検討した。

(2) 実施内容

カarbon材料の機械的物性計算・評価に関する研究

<http://www.me.ehime-u.ac.jp/labo/kikaisys/robins/index.htm>

A. 構造モデルの精密化

昨年度作成したグラファイトの多結晶モデルは、比重や弾性率といった特性が現在カarbon材料の主流となっているポリアクリロニトリル系炭素繊維の実測値に一致しないという問題があった。そこで、上記の多結晶モデルに対して高温高圧状態でアニールする分子動力学シミュレーションを行なって、結晶と非晶(アモルファス)が混在した構造の形成について検討した。また、モデルのさらなる精密化を図るため、補助金の委託事業費を使用して、陽電子消滅測定を行い、炭素繊維のナノ空孔のサイズや分布状態を評価し、モデル構築に反映した。得られたモデルの基礎物性を評価した結果、比重や弾性率などの他、熱伝導率のような熱的特性についても現実のポリアクリロニトリル系炭素繊維の構造に近いモデルが得られることを見出した。また、得られたモデルの引張りシミュレーションを行い、マクロ欠陥を含まない場合の強度、すなわち限界強度を明らかにした。

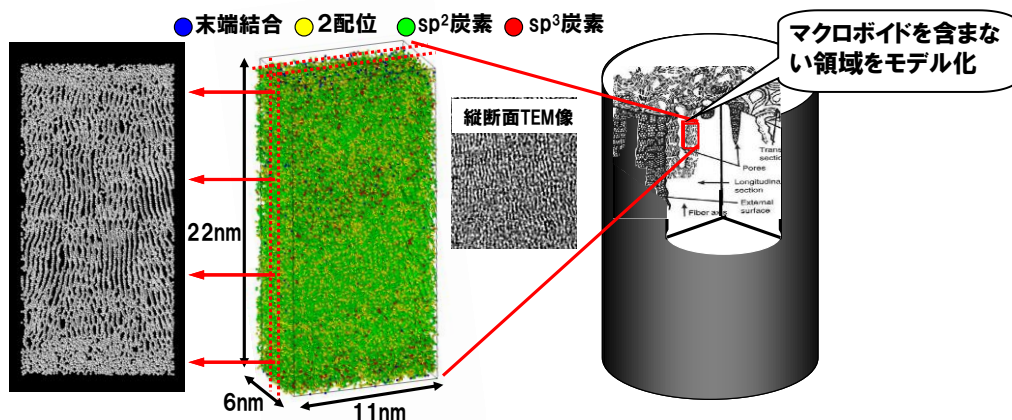


図1 ポリアクリロニトリル系炭素繊維のモデル構築

イ. 強度支配要因の推定

配向度が異なり原子数が6~7万のグラファイト多結晶モデルを用いて、強度への影響を調べた。本結果については、国際会議（ICCM2012）で発表した。また、グラファイト結晶子および多結晶モデルに対して、グラファイト構造を形成しているsp²結合の一部をダイヤモンドに見られるsp³結合に変換して、強度への影響を検討した。その結果、配向度の強度への影響が、他の欠陥に比べて大きいことを見出した。さらに多結晶モデルにおける結晶子のグラフェン層間にsp³結合を導入することにより、ヤング率および強度が向上することを見出した。本結果については、国際会議（M3）で発表した。

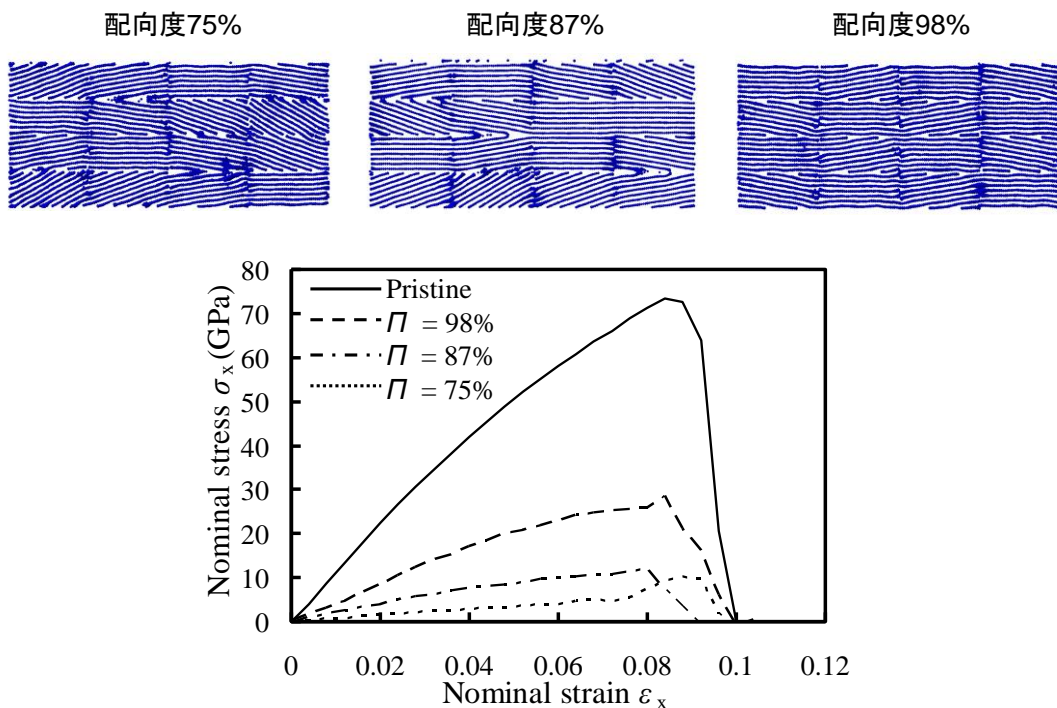


図2 配向度の異なるグラファイト多結晶モデルの応力-歪み曲線

これまででは、原子空孔、窒素原子、結晶粒界、配向度、sp³結合などの欠陥が単独で存在した場合の影響について調べてきたが、現実のカーボン材料は、複数の欠陥が混在している。そこで、2種類の欠陥が存在した場合に、強度に与える影響を調べた。2種類の欠陥として、結晶粒界と窒素原子、原子空孔と窒素原子、sp³結合と窒素原子の3ケースについて検討した。その結果、強度に与える各欠陥の影響の大小が明確になった。



図3 国際会議（ICCM2012）での発表風景

2 予想される事業実施効果

本事業の研究により得られた最大の成果は、配向度、格子欠陥、結晶粒界などの欠陥を含み、そして比重や弾性率、熱伝導率などの基礎物性が実測値に近いカーボン材料をコンピュータ上に構築したことにある。さらに、陽電子消滅法を用いることにより、カーボン材料の欠陥分布が明らかになり、モデルの精密化が可能となった。今後は本モデルを応用して、カーボン材料の引張強度だけでなく、圧縮強度や剪断強度の評価を行い、活用の幅を広げることが期待できる。また、現行のモデルには、電子顕微鏡で確認できる程度のマクロな欠陥を考慮していないが、現実には、このようなマクロ欠陥も強度に影響しているため、今後はマクロ欠陥を考慮したモデリングを目指していくことが重要である。

3 本事業により作成した成果物等

【論文・学会発表】

- (1) Ito, A., Okamoto, S., Mechanical Properties of Single- and Quadruple-crystalline Graphites containing Interlayer sp³ Bonds using Molecular Dynamics Simulations, GSTF (Global Science and Technology Forum) Journal on Engineering Technology, Vol. 2, No. 1, (2013).

- (2) Okamoto, S., Ito, A., Mechanical properties of a double-crystalline graphite including a grain boundary and nitrogen atoms by molecular dynamics simulations, Proceedings of 4th International Conference on Computational Methods, (2012).
- (3) Ito, A., Okamoto, S., Effect of orientation parameters of multi-crystalline graphites on mechanical properties by molecular dynamics simulations, Proceedings of 4th International Conference on Computational Methods, (2012).
- (4) Ito, A., Okamoto, S., Effect of interlayer sp³ carbons on Mechanical Properties of Multi-crystalline Graphites using Molecular Dynamics Simulations, Proceedings of 2nd Annual International Conference on Materials Science, Metal & Manufacturing, (2012).
- (5) Ito, A., Okamoto, S., Molecular Dynamics Analysis on Effects of Vacancies upon Mechanical Properties of Graphene and Graphite, Engineering Letters, Vol. 20, Issue 3, (2012), pp. 271–278.
- (6) Okamoto, S., Ito, A., Effects of Nitrogen Atoms on Mechanical Properties of Graphene by Molecular Dynamics Simulations, Engineering Letters, Vol. 20, Issue 2, (2012), pp. 169–175.

4 事業内容についての問い合わせ先

所属機関名： 愛媛大学（エヒメダイガク）

住 所： 〒790-8577

愛媛県松山市文京町3番

申 請 者： 教授 岡本伸吾（オカモトシngo）

担 当 部 署： 大学院理工学研究科 生産環境工学専攻（ダイガクインリコウガクケンキュウカ セイサンカンキョウコウガクセンコウ）

E-mail： okamoto.shingo.mh@ehime-u.ac.jp

URL： <http://kenqweb.office.ehime-u.ac.jp/Profiles/0009/0002042/profile.html>