含水した Nafion117 に通電したときの水の拡散と 構造力学(変形)の連成有限要素解析*

岡本 伸 吾^{*1}, 桑原 克典^{*2}, 大塚 寛 郎^{*3}

Finite-Element Analysis Coupling Water Diffusion and Structural Mechanics (Deformation) on Wet Nafion117 Electrified in Water

Shingo OKAMOTO^{*4}, Katsunori KUWABARA and Kakurou OTSUKA

^{*4} Department of Mechanical System Engineering, Hiroshima University,
1-4-1 Kagamiyama, Higashi-Hiroshima-shi, Hiroshima, 739-8527 Japan

The purpose of this research is to develop a method to perform Finite-Element Analysis (FEA) coupling water diffusion and structural mechanics (deformation) on Electro-Active Polymer (EAP) such as Nafion117 electrified in water. In the present report, first, mechanism why a piece of wet Nafion117 in water is deformed when it is electrified, was thought up referring the experimental results. Then the equation of water diffusion in the case that water molecules move from a positive electrode to a negative one with movement of cations in wet Nafion117 when it is electrified, was derived on the proposed mechanism of deformation. Then the procedure to calculate problems coupling water diffusion and structural mechanics was devised. FEA coupling water diffusion and linear structural mechanics were also performed following the experiments on electricity. Validity of the mechanism of deformation, the formulation of water diffusion and the procedure of coupling FEA was proved by comparing the calculated results with the experimental one.

Key Words: Finite Element Analysis, Electro Active Polymer, Nafion117, Diffusion, Coupling Analysis

1. 結 言

電気活性高分子 (Electro-Active Polymer: EAP) 材料は、水溶液中に浸し、水を浸透させた状態で通電すると変形することが知られている。この EAP は、変形するときの応答が速い、小さな電流で大変形する、また制御が容易である、さらに人体に無害である等の理由で、EAP を使用したアクチュエータは、今後、医療器具、たとえばカテーテルとして利用できるのではないかと注目されている。一方、EAP に関する従来の研究では、Nafion117(EAP の一種)に通電する実験を行い、通電したとき変形することが確認されている⁽¹⁾。また、乾燥状態の Nafion117 について微小変形させてヤング率を測定している⁽²⁾。しかし、Nafion117 は何らかの水溶液に浸し、水を浸透させた状態でないと通電しても変形しない。従って、Nafion117 の材料

特性を調べるときは、Nafion117 を水溶液中に浸し、水を浸透させた状態で材料試験を行う必要がある。

そこで、著者ら⁽³⁾は、これまでに、短冊状の Nafion117 の両側に電極として金メッキを施した試験片を蒸留水中に浸し、水を浸透させた状態で通電する実験を行い、Nafion117 に加わる電圧と電流および Nafion117 の変形変位を測定し、電圧と電流および変形変位との関係を求めた。さらに、有限要素解析 (FEA) を行う場合に必要な Nafion117 の物理量 (含水した Nafion117 の体積含水率、体積含水率の増加による線膨張係数、比体積、含水した Nafion117 のヤング率、短冊状の Nafion117 に金メッキを施した試験片のレイリー減衰係数等) を求めた。

本報は、有限要素解析 (FEA) により Nafion117 に水を浸透させた状態で通電したときの変形挙動を模擬できる計算手法を確立することを目的としている。まず、Nafion117 に水を浸透させた状態で通電した場合の変形原理をもとに、含水した Nafion117 に通電したときに、Nafion117 内部の体積含水率を求めることのできる水の拡散方程式を導出した。さらに、導出した水の拡散方程式と構造解析に関する式とを連立させて

* 原稿受付 2005 年 7 月 12 日。

^{*1} 正員、広島大学大学院工学研究科(☎ 739-8527 東広島市鏡山 1-4-1)。

^{*2} 帝人ファーマ(株)医療技術研究所(☎ 740-8511 岩国市日の出町 2-1)。

^{*3} 広島大学大学院工学研究科。

E-mail: okamoto@mec.hiroshima-u.ac.jp

解く拡散-構造連成有限要素解析の計算手法を考案した。さらに、考案した拡散-構造連成解析の手法を用い、通電実験を模擬した計算を行い、計算結果と実験結果とを比較し、導出した拡散方程式および拡散-構造連成解析の手法の妥当性について検討した。

2. 水の拡散方程式

体積含水率 $H(x_1, x_2, x_3, t)$ を求めることができる拡散方程式を導出する。

2.1 体積含水率 (H) の定義 ⁽³⁾ 乾燥状態の体積が v_{dn} (添え字 dn は, *dried n*afion を意味している) の Nafion117 が吸収した水の体積を v_{aq} とするとき、体積含水率 H を次式で定義した。

$$H = \frac{v_{aq}}{v_{dn}} \quad (1)$$

2.2 通電による Nafion117 の変形原理
Nafion117 の変形原理の概略図を図 1 に示す。Nafion117 は疎水性鎖状高分子のテフロンと親水性の陽イオン (H^+) によって構成され、水溶液中に浸すと水分子が浸透する。水溶液中に保持してある Nafion117 に通電すると Nafion117 中のテフロンは移動しないが、陽イオン (H^+) はクーロン力により陽極側から陰極側に移動する。水溶液中では、Nafion117

Fig. 1 Mechanism of deformation of Nafion117 containing water.

(H^+) 内の陽イオンは静電相互作用や水素結合などにより Nafion117 内部に含まれている水分子と弱い結合をしている (水和作用)。したがって、陽イオン (H^+) の移動とともに、水和作用により陽イオン (H^+) と弱い結合をしている水分子が陽極側から陰極側に移動する。水分子が陽極側から陰極側に移動することで Nafion117 内部の陽極側の体積含水率は減少し、陰極側の体積含水率は増加する。この含水率の変化により陽極側は収縮し、陰極側は膨潤する。その結果、Nafion117 は陽極側に屈曲する。

2.3 拡散方程式 含水した Nafion117 に通電すると陽イオンの移動とともに水分子が移動する。その結果、体積含水率 $H(x_1, x_2, x_3, t)$ は場所と時間によって異なるように分布する。そして、 $H(x_1, x_2, x_3, t)$ の高低差により、水が拡散 (移動) する。ここでは、陽イオンの移動とともに移動する水と、その後の水の拡散による水の体積含水率を求めることができる拡散方程式を導出する。なお、ここでは拡散による水分子の移動速度は小さいものとみなして水移動の慣性効果は無視した。

まず、Nafion117 内部の微小領域 ($dx_1 dx_2 dx_3$, 図 2 参照) における水の拡散による体積変化量を求める。

$$\begin{aligned} & -\kappa_d \frac{\partial H}{\partial x_1} dx_2 dx_3 \\ & - \left\{ -\kappa_d \frac{\partial H}{\partial x_1} + \frac{\partial}{\partial x_1} \left(-\kappa_d \frac{\partial H}{\partial x_1} \right) dx_1 \right\} dx_2 dx_3 \\ & = \kappa_d \frac{\partial^2 H}{\partial x_1^2} dx_1 dx_2 dx_3 \quad (2) \end{aligned}$$

Fig. 2 Diffusion of water in infinitesimal section.

x_1 方向の水の拡散による, 単位時間あたりの水の体積変化量は次式で表される. ここで, κ_d は拡散係数を表している. 同様に, x_2 および x_3 方向の水の体積変化量は次式で表される.

$$\kappa_d \frac{\partial^2 H}{\partial x_2^2} dx_1 dx_2 dx_3 \quad (3)$$

$$\kappa_d \frac{\partial^2 H}{\partial x_3^2} dx_1 dx_2 dx_3 \quad (4)$$

したがって, 微小領域における水の拡散による, 単位時間あたりの水の体積変化量は次式で表される.

$$\kappa_d \left(\frac{\partial^2 H}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 H}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 H}{\partial x_3^2} \right) dx_1 dx_2 dx_3 \quad (5)$$

次に, 陽イオンの移動とともに水分子が移動することによる水の体積増加率を $\dot{v}_c(x_1, x_2, x_3, t)$ (単位時間あたり, 乾燥した Nafion117 の単位体積あたり) とすると微小領域での陽イオンの移動による, 単位時間あたりの水の体積変化量は次式で表される.

$$\dot{v}_c(x_1, x_2, x_3, t) dx_1 dx_2 dx_3 \quad (6)$$

また, 微小領域における単位時間あたりの水の体積変化量は, Nafion117 の乾燥状態の密度を ρ_{dn} , 比体積を c_q とすると次式で表される.

$$\frac{\partial(\rho_{dn} c_q H)}{\partial t} dx_1 dx_2 dx_3 = \rho_{dn} c_q \frac{\partial H}{\partial t} dx_1 dx_2 dx_3 \quad (7)$$

したがって, 式 (7) は微小領域における水の拡散による水の体積変化量と陽イオンの移動による水の体積変化量の和であるので, 式 (5) と式 (6) を用いて次式で表される.

$$\begin{aligned} & \rho_{dn} c_q \frac{\partial H}{\partial t} dx_1 dx_2 dx_3 = \\ & \kappa_d \left(\frac{\partial^2 H}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 H}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 H}{\partial x_3^2} \right) dx_1 dx_2 dx_3 \\ & + \dot{v}_c(x_1, x_2, x_3, t) dx_1 dx_2 dx_3 \end{aligned} \quad (8)$$

さらに, 式 (8) を整理すると, 次式のように水の拡散方程式が得られる.

$$\begin{aligned} & \kappa_d \nabla^2 H(x_1, x_2, x_3, t) + \dot{v}_c(x_1, x_2, x_3, t) \\ & - \rho_{dn} c_q \frac{\partial H}{\partial t} = 0 \end{aligned} \quad (9)$$

ここで,

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \quad (10)$$

である.

2.4 陽イオンの移動による水の体積増加率 解

解析対象が図 3 に示すような直方体の場合, x_2 - x_3 断面の断面積 ($A = l_2 l_3$) は x_1 方向に一様であるので, $\dot{v}_c(x_1, x_2, x_3, t)$ と $H(x_1, x_2, x_3, t)$ を次のように書き換えることができる. ここで, l_1 , l_2 , l_3 は, それぞれ試験片の厚さ, 幅, 長さを表している.

$$\dot{v}_c(x_1, x_2, x_3, t) = \dot{v}_c(x_1, t) \quad (11)$$

$$H(x_1, x_2, x_3, t) = H(x_1, t) \quad (12)$$

Nafion117 内部に流れる電気量 $Q(t)$ は, 陽極側から陰極側に移動する陽イオンの数 $N_c(t)$ と電気素量 $e (= 1.6 \times 10^{-19} [\text{C}])$ を用いて次式で表される.

$$Q(t) = e N_c(t) \quad (13)$$

さらに, 電流 $I(t)$ は, 式 (13) を用いて次式で表される.

$$I(t) = \dot{Q}(t) = e \dot{N}_c(t) \quad (14)$$

したがって, 陽極側から陰極側へ単位時間に移動する水分子の数 $\dot{N}_{aq}(t)$ は $\dot{N}_c(t)$ に比例するので比例係数を a とすると, 式 (14) より次式で表される.

$$\dot{N}_{aq}(t) = a \dot{N}_c(t) = \frac{a}{e} I(t) \quad (15)$$

ここで, a は水溶液の種類によって決まる係数である. 次に, アボガドロ定数を $N_A (= 6.02 \times 10^{23} [\text{mol}^{-1}])$ とすると, 陽極側から陰極側に単位時間に移動する水分子の物質質量 $\dot{n}_{aq}(t)$ は, 式 (15) より次式で表される.

$$\dot{n}_{aq}(t) = \frac{\dot{N}_{aq}(t)}{N_A} = \frac{a}{N_A e} I(t) \quad (16)$$

O - $x_1 x_2 x_3$: Coordinate frame
 l_1, l_2, l_3 : Length of Nafion117
 $A (= l_2 l_3)$: Area

Fig. 3 Dimensions of test piece.

Fig. 4 Water molecules moving with cations.

ここで、水のモル体積を $v_m (= 1.8 \times 10^{-5} [(m^3)_{aq} \text{mol}^{-1}])$ とすると、陽イオンの移動による単位時間あたりの水の体積変化量 $\dot{v}_{aq}(t)$ は、式 (16) より次式で表される。

$$\dot{v}_{aq}(t) = v_m \dot{n}_{aq}(t) = \frac{av_m}{N_A e} I(t) \quad (17)$$

陽イオンの移動により電極表面近傍の体積含水率が変化するが、体積含水率が変化する領域を ℓ_c (図 4 参照) と仮定すると、領域 ℓ_c において、次式が成り立つ。

$$\dot{v}_c(x_1, t) A \ell_c = \dot{v}_{aq}(t) = \frac{av_m}{N_A e} I(t) \quad (18)$$

したがって、 $\dot{v}_c(x_1, t)$ は、次式で表される。

$$\dot{v}_c(x_1, t) = \frac{av_m}{N_A e A \ell_c} I(t) \quad (19)$$

次に、 $a/(A \ell_c)$ を $a' (= a/(A \ell_c))$ とおき式 (19) に代入すると次式が得られる。

$$\dot{v}_c(x_1, t) = \frac{a' v_m}{N_A e} I(t) \quad (20)$$

ここで、式 (20) は水の拡散方程式 (9) における左辺第 2 項に相当している。

3. 有限要素解析 (FEA)

3.1 水の拡散有限要素方程式 有限要素法を用いて式 (9) を離散化すると有限要素方程式が得られる。

Table 1 Physical quantities used on heat transfer and water diffusion analyses

Heat transfer		Water diffusion	
κ	Coefficient of heat conductivity	κ_d	Coefficient of water diffusion
T	Temperature	H	Volume content of water
$\dot{Q}$	Internal heat rate	$\dot{v}_c$	Volume increase rate due to water moving with cations
ρ	Mass density	ρ_{dn}	Mass density of dried Nafion
c	Specific heat	c_q	Specific volume of water

そして、各要素の有限要素方程式を組み合わせ、境界条件を適用すると系全体の拡散有限要素方程式が次式のように得られる。

$$\mathbf{C}_d \dot{\mathbf{H}} + \mathbf{K}_d \mathbf{H} = \dot{\mathbf{v}}_c \quad (21)$$

ここで、 $\mathbf{H}$ は節点体積含水率ベクトル、 $\mathbf{C}_d$ は水の体積マトリクス、 $\mathbf{K}_d$ は水の拡散マトリクス、 $\dot{\mathbf{v}}_c$ は陽イオンの移動による水の体積増加率を表している。

なお、FEA のソルバーとしては ANSYS (Ver.7.11, 汎用 FEA ソフト) を用いたが、水の拡散解析では ANSYS の熱伝導解析の機能を用いて、熱伝導解析で用いられる物理量を水の拡散解析で用いられる物理量に置き換えて計算した。表 1 に熱伝導解析と水の拡散解析に用いられる物理量の対照表を示す。

3.2 構造有限要素方程式 有限要素法を用いて離散化した各要素の有限要素方程式を組み合わせ、境界条件を適用すると次のように系全体の構造有限要素方程式が得られる。

$$\mathbf{M} \ddot{\mathbf{x}} + \mathbf{C} \dot{\mathbf{x}} + \mathbf{K}_e \mathbf{x} = \mathbf{f}(t) \quad (22)$$

ここで、 $\mathbf{x}$ は節点変位ベクトル、 $\mathbf{M}$ は質量マトリクス、 $\mathbf{C}$ は減衰マトリクス、 $\mathbf{K}_e$ は線形剛性マトリクス、 $\mathbf{f}(t)$ は節点力ベクトルを表している。

3.3 水の拡散—構造連成解析

3.3.1 計算手順 水の拡散と構造の連成解析を行うにあたっては、連成解析を行うための計算手順を

考案した。そして、考案した計算手順で計算が行えるようなプログラム (ANSYS のユーザープログラム) を作成して計算を行った。連成解析の計算手順を図 5 に示す。

図 5 に示すように、時刻 $t = t$ において体積含水率が $\mathbf{H}(\mathbf{x}_n, t)$ である Nafion117 層に陽イオンの移動による水の体積増加率 $\dot{v}_c(\mathbf{x}_n, t)$ を与えて拡散解析を行い、時刻 $t = t + \Delta t$ の体積含水率 $\mathbf{H}(\mathbf{x}_n, t + \Delta t)$ を求める。なお、水の体積増加率 $\dot{v}_c(\mathbf{x}_n, t)$ を与える場合、

$\mathbf{x}_n(t)$: Position vector denoting coordinates of nodal point at time t .

$\mathbf{H}(\mathbf{x}_n, t)$: Volume content of water.

$\Delta \mathbf{H}$: Incremental volume content of water between t and $(t + \Delta t)$.

$\dot{v}_c(\mathbf{x}_n, t)$: Volume increase rate of water that moves with cations.

λ : Coefficient of linear expansion relating to $\Delta \mathbf{H}$.

E_{wn} : Young's modulus of wet Nafion 117.

$\Delta \mathbf{f}$: Incremental stress by $\Delta \mathbf{H}$.

Fig. 5 Procedure of Finite-Element Analysis coupling water diffusion and structural mechanics.

本報では、Nafion 層の陽極側の面には、式 (17) で表される $-\dot{v}_{aq}(t) \left(= -\frac{\alpha_{aq} m}{N_A e} I(t) \right)$ が一様に分布するように、また陰極側の面には、 $+\dot{v}_{aq}(t) \left(= +\frac{\alpha_{aq} m}{N_A e} I(t) \right)$ が一様に分布するように与えた。次に、 Δt の間の体積含水率の増分 $\Delta \mathbf{H}$ を求め、 $\Delta \mathbf{H}$ を用いて節点力 $\Delta \mathbf{f} (= E_{wn} \lambda \Delta \mathbf{H})$ を求める。そして、Nafion117 層に $\Delta \mathbf{f}$ を与え構造解析を行い、 $t = t + \Delta t$ における変形量 $\mathbf{x}_n(t + \Delta t)$ を求める。

以上の手順で計算を行うことによって水の拡散と構造の連成解析を行った。

3.3.2 FEA モデル 図 6 に通電実験に用いた試験片⁽³⁾の構成と寸法を示す。全長 $30 \times 10^{-3} [\text{m}]$ のうち端から $5 \times 10^{-3} [\text{m}]$ の部分は固定のために使用したので、片持ちの試験片の有効長さは $25 \times 10^{-3} [\text{m}]$ である。Nafion 層の FEA モデルとしては、固定端から自由端までの長さが $l_3 = 25 \times 10^{-3} [\text{m}]$ 、幅が $l_2 = 4 \times 10^{-3} [\text{m}]$ 、厚さが $l_1 = 0.185 \times 10^{-3} [\text{m}]$ の部分を $x_2 = 0$ における x_1 - x_3 面について対称である (図 3 参照) ことを利用して $x_2 \geq 0$ の部分をモデル化した。Nafion117 層の有限要素としては 8 節点-六面体要素を使用し、 x_1 (厚さ) 方向に 5 等分割、 x_2 (幅) 方向に 16 等分割、 x_3 (長手) 方向に 160 等分割した。厚さが $0.007 \times 10^{-3} [\text{m}]$ の金メッキ層の有限要素としては、4 節点-四辺形要素を使用し、4 節点-四辺形要素の節点と Nafion 層の端の面の節点とを共有させ、 x_2 (幅) 方向に 16 等分割し、 x_3 (長手) 方向に 160 等分割した。従って、総要素数は 17,920 である。

Fig. 6 Composition and dimensions of testpiece

3.3.3 拡散解析の計算条件 Nafion117 の材料定数⁽³⁾としては、Nafion117 の乾燥状態での密度は $\rho_{dn} = 2,148 [\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}]$ 、平衡状態の体積含水率は $H_{eq} = 0.43 [(m^3)_{aq} (m^{-3})_{dn}]$ 、体積含水率の増加による線膨張係数は $\lambda = 0.243 [(m^3)_{dn} (m^{-3})_{aq}]$ 、単位質量の Nafion117 の体積含水率を 1 だけ上昇させるのに必要な含水体積は $c_q = 4.654 \times 10^{-4} [\text{m}^3 \cdot \text{kg}^{-1}]$ の値を用いた。

また、境界条件としては、 $x_2 = 2 \times 10^{-3} [\text{m}]$ の x_1 - x_3 面と、 $x_3 = 0 [\text{m}]$ の x_1 - x_2 面および

$x_3=25 \times 10^{-3}[\text{m}]$ の x_1 - x_2 面に, 体積含水率として $H_{eq}=0.43[(\text{m}^3)_{aq}(\text{m}^{-3})_{dn}]=\text{const.}$ を与え, $x_2=0[\text{mm}]$ の x_1 - x_3 面には, x_2 方向の水の移動量が零の条件を与えた.

さらに, 初期条件としては, つまり Nafion117 層の要素の $t=0[\text{s}]$ における体積含水率としては $H_{eq}=0.43[(\text{m}^3)_{aq}(\text{m}^{-3})_{dn}]$ の値を与えた.

3.3.4 構造解析の計算条件 構造解析に用いる Nafion117 の材料定数⁽³⁾であるヤング率とレーリー減衰係数としては, 自由振動の実験によって得られた値 $E_{wn}=7[\text{MPa}]$ および $\alpha_{wn}=0[\text{s}^{-2}]$ と $\beta_{wn}=0.02[\text{s}^{-1}]$ を用い, ポアソン比としては $\nu_{wn}=0.3$ の値を用いた. また, 密度としては $\rho_{wn}=1,911[\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}]$ の値を用いた(添え字 wn は, *wet nafion* を意味している). また, 金メッキ層の材料定数⁽⁴⁾であるヤング率とポアソン比および密度としては, $E_g=78[\text{GPa}]$, $\nu_g=0.43$, $\rho_g=19,300[\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}]$ の値を用いた.

また, 境界条件としては, Nafion117 層および金メッキ層ともに, $x_3=0$ の固定端に固定の拘束条件を与え, $x_2=0$ における x_1 - x_3 面に対称の条件を与えた.

さらに, 初期条件としては, すべての節点の変形変位と速度および加速度を零とした.

4. 結果と考察

試験片に $1.0[\text{V}]$ の電圧で通電したときに試験片に加わった電圧と試験片に流れた電流の実験結果⁽³⁾を図7に示す. さらに, $1.0[\text{V}]$ の電圧で試験片に通電したときの測定点(p_m , 試験片の先端から $5 \times 10^{-3}[\text{m}]$ の位置)における変位の実験結果⁽³⁾と, 式(17)の電流 $I(t)$ としては図7に示した電流値を用い, 式(9)の拡散係数 κ_d は一定値($\kappa_d=1.7 \times 10^{-9}[(\text{m}^3)_{aq}(\text{m}^{-3})_{dn}\text{m}^2\text{s}^{-1}]$)とし, 式(17)の係数 a をパラメーターとして値を変えて計算した結果を図8に示す. なお, 図7に示したように, 一定電圧をかた時, 電流は初期に急に大きくなり, その後徐々に小さくなり, やがて零になる. 電流が零になると, 通電により移動した水分子は拡散により移動し, 体積含水率が初期の分布状態に戻り, 定常状態では変位は零になる. 図8より, a が大きくなると変形変位が大きくなることが分かる. また, 変形変位が立ち上がる時の変位は, a の変化によって著しく変化することが分かる. 一方, 係数 a は陽イオンと結合した水分子の数に関する量である. 従って, Nafion117 の変形原理から分かるように, a の値が大きくなるとことは通電によって移動する水分子の数が多くなることを意味している. 以上のことから, a が大きくなると変形変位が大きくなっていること, および通電

によって変形変位が立ち上がる時に変位が著しく変化している計算結果は妥当であることが分かる. なお, 拡散係数が $\kappa_d=1.7 \times 10^{-9}[(\text{m}^3)_{aq}(\text{m}^{-3})_{dn}\text{m}^2\text{s}^{-1}]$ のもとでは, 係数 a として $a=3.55 \times 10^{14}$ の値を用いた場合に計算値と実験値とが良く一致していた.

次に, 係数 a は一定値($a=3.55 \times 10^{14}$)とし, 拡散係数 κ_d をパラメーターとして値を変えて計算した場合の結果を図9に示す. 図9に示すように, a が一定値の場合, 拡散係数 κ_d が変化しても, 変形変位が立ち上がる時の変位は, 図8に示す結果に比べてあまり変化していない. 一方, 変位が立ち上がった後, 徐々に減衰していくときは, 変位は κ_d の値に大きく影響され, κ_d の値が大きくなると変位は速く減衰することが分かる. 拡散係数 κ_d は, 通電によって移動した水分子を元の状態に戻す効果に影響する量なので, これらの結果は妥当であることが分かる. なお, $a=3.55 \times 10^{14}$ のもとでは, $\kappa_d=1.7 \times 10^{-9}[(\text{m}^3)_{aq}(\text{m}^{-3})_{dn}\text{m}^2\text{s}^{-1}]$ の値を用いた場合に計算値と実験値とが良く一致していた.

以上の, 係数 a は通電によって変形変位が立ち上がる時の変位に著しく影響し, a が大きくなると変位が大きくなること, および κ_d は通電によって変位が立ち上がった後の変位の減衰の速さに著しく影響し,

(1) Voltage measured in test piece.

(2) Current flowing in test piece.

Fig. 7 Voltage and current when $V_a=1.0[\text{V}]$ was applied to test piece.

Fig. 8 Experimental result and calculated ones using various proportional coefficients (a), on displacements at measuring point (p_m , position which is 5×10^{-3} [m] from free end), when voltage of 1.0[V] was applied to test piece.

Fig. 9 Experimental result and calculated ones using various diffusion coefficients (κ_d), on displacements at measuring point (p_m , position which is 5×10^{-3} [m] from free end), when voltage of 1.0[V] was applied to test piece.

κ_d が大きくなると変位は速く減衰する計算結果は、本報で提案した定式化および計算手法が実際の現象を良く模擬できていることを示している。

5. 結 言

本報では、有限要素解析により Nafion117 に水を浸透させた状態で通電した場合の変形挙動を模擬できる計算手法を確立するために以下のことを行った。

- (1) Nafion117 に水を浸透させた状態で通電した場合の変形原理をもとに、Nafion117 に通電したときの Nafion117 内部の体積含水率を求めることのできる水の拡散方程式を導出した。
- (2) 導出した水の拡散方程式と構造解析に関する式とを連立させて計算する手法を考案し、計算を実行するためのユーザープログラム (ANSYS Ver.7.11) を作成した。
- (3) 作成したユーザープログラムを用いて通電実験を模擬した計算を行い、計算結果と実験結果とを比較し、提案した計算手法により Nafion117 に水を浸透させた状態で通電した場合の変形挙動を模擬できることを示した。

文 献

- (1) Asaka K., and Oguro K., Bending of Polyelectrolyte membrane platinum composites by electric stimuli, *Journal of Electroanalytical Chemistry*, **480** (2000), 186-198.
- (2) Y. Bar-Cohen, Electroactive Polymer Actuators as Artificial Muscles, *SPIE Press.*, (2001), 152-154.
- (3) Okamoto S., Kuwabara K. and Otsuka K., Electrical Stimuli-induced Deformation and Material Properties of Electro-Active Polymer Nafion117 (in Japanese), *JSME*, (2005) in Printing.
- (4) Physics encyclopedia editing committee et al., Physics encyclopedia (in Japanese), *Baifukan Co. Ltd.*, (1998), 2358.

付 録

以下に本報で用いた記号の説明をする。

- A : 試験片の断面積 ($= l_2 l_3$)
 a : 水溶液の種類によって決まる係数
 a' : 係数 ($= a/(Al_c)$)
 C : 減衰マトリクス

C_d : 水の体積マトリクス
 c_q : Nafion117 の乾燥状態の比体積
 e : 電気素量
 f : 節点力ベクトル
 H : 節点体積含水率ベクトル
 ΔH : 節点体積含水率ベクトルの増分
 H : 体積含水率
 I : 電流
 N_{aq} : 陽極側から陰極側に移動する水分子の数
 K_e : 線形剛性マトリクス
 K_d : 水の拡散マトリクス
 (l_1, l_2, l_3) : 試験片の x_1, x_2, x_3 方向の長さ
 l_c : 体積含水率が変化する領域
 M : 質量マトリクス
 N_A : アボガドロ定数
 N_c : 陽極側から陰極側に移動する陽イオンの数
 n_{aq} : 陽極側から陰極側に移動する水分子の物質量
 Q : Nafion117 内部に流れる電気量
 t : 時間
 v_{aq} : 陽イオンの移動による水の体積変化量
 $\dot{v}_c$: 陽イオンの移動による水の体積増加率
 v_c : 陽イオンの移動とともに水分子が移動すること
 による水の体積増加率 (乾燥した Nafion117 の
 単位体積あたり)
 v_m : 水のモル体積
 x : 節点変位ベクトル
 x_n : 節点の座標を表している位置ベクトル
 (x_1, x_2, x_3) : 座標軸
 $(\alpha_{wn}, \beta_{wn})$: 試験片のレーリー減衰係数
 κ_d : 拡散係数
 λ : ΔH による線膨張係数
 ρ_{dn} : Nafion117 の乾燥状態の密度