

基于非局部弹性应力场理论的纳米尺度 效应研究:纳米梁的平衡条件、控制 方程以及静态挠度*

C·W·林

(香港城市大学 建筑系,香港)

(郭兴明推荐)

摘要: 该文成功地解答了3个关于非局部应力理论用于纳米梁的问题:(i)在绝大多数研究中,非局部效应增加导致纳米结构体刚度下降,其现象表现为弯曲挠度增加,固有频率减少,屈曲载荷下降,但为什么Eringen的非局部弹性理论给出了完全相反的结论;(ii)为什么在某些研究结果中,非局部效应消失或是对研究结果无影响,比如纳米悬臂梁在集中载荷作用下的弯曲挠度;(iii)在高阶控制方程中,为什么高阶边界条件不存在.通过应用非局部弹性理论和精确变分原理分析纳米梁的弯曲问题,推导出全新的平衡条件、控制方程、边界条件和静态响应.这些方程和条件包含了与之前的相关研究结果符号相反的高阶微分项,这一差别导致了纳米效应对结构体的影响结果完全相反.还证明之前为大家所公认的纳米梁静态或动态平衡条件实际上没有达到平衡,只有用等效弯矩代替非局部弯矩时,才可达到平衡.这些结论通常是可以被其它方法,比如应变梯度理论、耦合应力模型以及相关实验所证明.

关键词: 弯曲; 等效非局部弯矩; 纳米梁; 纳米力学; 纳米尺度; 非局部应力; 应变梯度

中图分类号: O343 **文献标志码:** A

DOI: 10.3879/j.issn.1000-0887.2010.01.005

引 言

自从20世纪90年代初,Iijima^[1]发现碳纳米管(CNTs)以来,关于CNTs的研究成果被大量报道,比如Treacy等^[2]以及Ball^[3]的工作.针对CNTs的研究建立在两种模型上:原子模型和连续模型.最常见的原子模型是分子动力学(MD)模型^[4-6].由于MD方法要考虑每一个分子及其相互之间的力学和化学作用,运行相关程序通常需要相当高效的硬件设备,系统所含的分子数目也不能太庞大.受到该条件制约,很多人采用连续模型来对CNTs进行模拟,因为该模型可以研究尺寸相对较大的系统.该方法引申出诸多线性和非线性梁以及壳模型,用以分析CNTs的静态和动态响应、振动稳定性等问题.其中较早的研究是Yakobson等^[7],利用壳模型

* 收稿日期: 2009-09-29; 修订日期: 2009-11-19

基金项目: 香港特别行政区研究资助委员会资助项目(RGC HKSAR, City U117406)

作者简介: C. W. Lim, 副教授, 博士(Tel: +852-27887285; E-mail: becwl@cityu.edu.hk).

研究 CNTs 在受压载荷条件下的非稳定性, Ru^[8-9] 还利用不同的壳模型研究了 CNTs 的屈曲。这些连续梁或者壳模型, 被看作经典模型或是局部介质模型, 因为每一点的应力都是该质点应变的函数。尽管有一些实验证明^[10], 但局部连续介质模型没有展示尺度效应, 无法模拟微观原子介质中非常重要的各项异性行为。尺度效应^[11-17] 由于其重要性, 已经成为连续纳米力学模型研究的一个富有挑战性的领域。

其中一个考虑到尺度效应的连续力学模型是由 Eringen^[18-35] 提出的非局部场理论模型。该理论认为域内的一点的应力不只取决于该点本身的应力, 而是整个领域内所有点的应力和, 相当于领域内的应力平均值。在过去的 30 年中, 很多非局部理论的分支由 Eringen 和他的同事分别建立, 包括非局部纯弹性理论^[18-19, 21-22, 32], 非局部流体力学^[20, 23], 非局部电磁学^[24], 非局部热弹性理论^[25-26], 非局部记忆弹性体^[26-27], 非局部压电理论^[33-34] 等。该理论的应用在物理和工程方面已有很好的实践^[28-31, 35], 而这些实践者都借鉴了 Eringen 的参考书: 非局部场理论^[35]。

非局部弹性场理论在研究 CNTs 和其它纳米结构方面的应用开始于本世纪初。之前该理论没有得到重视是因为无法求解关于非局部量 $\alpha | \mathbf{x}' - \mathbf{x} |$ 的方程。该方程需要用 Green 函数在特定形状的区域中求解。对于弹性连续体的工程运用, 如纳米梁或者纳米管的非局部量可能会有特殊的条件, 比如只考虑一维、二维或三维情况。对于二维情况, Eringen^[32, 35] 指出可以进一步简化成在二维领域内的二阶偏微分方程, 但造成了 6% 的相对误差。考虑到一维情况的纳米结构, 上述二阶方程可进一步简化为二阶常微分方程。根据这一常微分方程, 可以准确求解分析 CNTs 和其它一维纳米结构的静态和动态响应, 比如弯曲、振动、屈曲和波传导。

在此二阶常微分方程基础上, CNTs 和其他纳米结构的连续介质模型的分析工作得到发展。早期工作最先由 Peddieson 等^[36] 应用非局部应力模型分析了正弦载荷下简支纳米梁、端部集中载荷下悬臂纳米梁以及非均布力下悬臂纳米梁的静态弯曲问题。与此同时, Sudak^[37] 研究了多壁碳纳米管的圆柱屈曲并指出临界屈曲载荷随着纳米尺度效应的增加而减小。后来, 出现了大量应用此非局部应力方法的模拟工作(经确认, 自 2003 年来共有超过 80 篇论文和 1 部著作), 其中包括纳米梁(5 篇论文和 1 部著作)和纳米板(1 篇论文)的弯曲; 纳米梁(12 篇论文), 纳米环/纳米曲梁(1 篇论文), 纳米板(1 篇论文)和纳米壳(1 篇论文)的振动; 纳米梁(8 篇论文)和纳米壳(9 篇论文)的屈曲; 纳米梁(8 篇论文)和纳米壳(7 篇论文)的波传播; 纳米梁(3 篇论文)和纳米板(1 篇论文)的一般结构分析; 以及其它论文。

在这些已经发表的工作中, 有些采用了薄梁、薄板或者薄壳理论, 也就是横截面变形前后始终垂直于中性面并且中性面不可延伸, 而其他一些通过剪切修正系数考虑剪切变形, 变形后允许中性面转动。薄结构理论应用于纳米梁(28 篇论文和 1 部著作)、纳米板(3 篇论文)和纳米壳(19 篇论文); 而厚结构理论, 也就是 Timoshenko 和 Mindlin 理论应用于纳米梁(17 篇论文)和纳米板(1 篇论文)。本文将清楚地表明这些非局部理论模拟工作(参见文献[36-37]及其他)可以明确地归类为“部分非局部应力模型”, 因为它们是从经典模型直接扩展得到, 没有经过严格的证明。因此, 有些非常重要的非局部项推导错误并且高阶项被不经意的忽略, 模型实际上并不满足平衡条件。

本文将证明非局部弯矩高阶项的存在非常重要, 它将完全改变人们对纳米尺度效应的认识, 如果没有这些高阶项, 将导致本文摘要里指出的两个诡异的现象: (i) 虽然跟非局部弹性场理论^[35] 的物理直觉相反, 但为什么该领域几乎所有已经发表的工作认为非局部效应的增加在许多情况会导致纳米结构刚度降低? 但又并非全部如此(如均布载荷下的悬臂纳米梁);

(ii) 许多经典的算例结果表明纳米尺度效应消失了^[36]。

随着非局部应力场理论和它的许多应用研究的发展,纳米力学出现了许多新的分支,如应变梯度理论^[38-39],分子结构力学方法^[40]和基于变分法和最小势能原理的修正应力耦合理论^[41-43]。尤其是 Nix 和 Gao^[38]利用几何必须位错的概念成功得出晶体材料的硬度具有很强的尺寸效应。他们进一步建立了一个众所周知的关系式,不仅比较了具有一定深度的压痕的硬度和本体的硬度,并且还得出结论,如果压痕深度下降到微米甚至纳米尺度,那么前者将明显大于后者。这个关系式后来被许多微压痕实验所验证。另一方面,Lam 等^[39]推导了一套新的高阶指标来描述应变梯度行为并随后发展了平面应变梁的应变梯度弹性弯曲理论。后来研究了 Bernoulli-Euler 梁的弯曲,通过材料内部长度尺度参数来考虑尺度效应。虽然从表面上看应变梯度理论^[39]和本文所述的非局部应力场理论有点类似,但实际原理和基本概念都不相同。应变梯度理论是基于应变能密度,而这又取决于一阶变形梯度的对称部分(经典应变)和二阶变形梯度;而后者是建立在非局部应力概念上,其中参考点的应力取决于弹性模量在整个区域内的体积分。在接下来的章节中,非局部应力的概念会更清楚。基于分子结构力学方法和表现为 Lennard-Jones 势和非线性的桁架杆模型的层间 Van der Waals 相互作用,Li 和 Chou^[40]证明了基于经典连续壳模型的单壁和双壁碳纳米管的基本振动频率比基于原子模拟的频率低 40%~60%。文献[39-43]虽然是从不同的物理概念的发展而来,但都指向一个相似的结论,也就是本文推导出的任何尺度效应下纳米尺度参数都将导致结构刚度的增加。通过实验被进一步证实(i)完整结构的微观叠层薄膜比单片薄膜拉伸强度要高的多^[44];(ii)其硬度也显著增加^[38];(iii)纳米悬臂梁的弯曲刚度随厚度的减小而显著增大^[39,45]。与经典解相比较,通过分子动力学模拟纳米管的波传播^[46]和屈曲^[47]同样显示出了纳米管的刚度增强行为。

纳米结构的一个潜在应用是悬臂纳米梁作为传动装置实际应用入微机电系统(MEMS)和纳机电系统(NEMS)。应用“部分非局部应力模型”求解端部集中载荷下纳米悬臂梁,得到和局部应力、经典悬臂梁相同的解,没有任何纳米尺度效应^[36]。而对于分布载荷下类似的悬臂梁,却显现出小尺度效应。这多少让人迷惑,因为集中载荷可以看成分布载荷作用在一个小的有限区域。因此,对于有限区域分布力(实际上也就是点载荷)和理论上理想的点载荷,“部分非局部应力模型”提出了一个令人惊奇的、不连续的、间断跳跃的解。

本文应用 Eringen^[35]提出的非局部弹性场理论和精确变分原理方法,推导出纳米梁弯曲的精确平衡条件、场控制微分方程和边界条件。这些方程和条件包括了必要的高阶项,而在静态和动态非局部纳米结构研究领域内几乎所有已经发表的工作在建模和分析过程中都遗漏掉了这些高阶项。遗漏的这些高阶项导致了与本文结果相反的纳米尺度效应。基于新的非局部应力模型,本文发现了纳米尺度下真正的平衡条件、控制微分方程和边界条件。同时推导出了各种边界条件下纳米梁弯曲的真正静态响应。在这种情况下,本文建立了一种新的渐进表示的一维纳米梁非局部应力模型。同时推导和讨论了应变梯度模型的无穷阶渐进控制微分方程和对应的无穷个边界条件。从实际应用出发,探讨了渐进非局部模型的缩减高阶解。求解了一些不同载荷和边界条件下的纳米梁算例来证实基于非局部模型的真正的纳米尺度效应。

文中提出的基于非局部应力模型的纳米梁弯曲分析结果可以用于工程师设计 MEMS 和 NEMS 设备。此外,高阶应变梯度解作为参考基准,纳米梁弯曲的精确、收敛的数值解通过其他数学和计算方法(如分子动力学模拟)取得。

1 应力场方程的推导

本节首先简短的描述了非局部弹性应力场理论的基本内容和薄梁(也叫作 Euler-Bernoulli

梁)理论,然后应用非局部弹性应力概念建立纳米梁模型.随后使用精确的变分原理方法,通过严格的能量公式,推导新的平衡条件和含有以前发表的相关论文里遗漏了的高阶项的场控制方程.

1.1 经典的弹性场和非局部弹性场方程

非局部应力场理论最先由 Eringen 和他的助手们引入固体力学和材料.它是基于晶格动力学的原子理论与声子色散的实验观测.按照这一理论,在均质各向同性体 V 内一参考点 \mathbf{r} 的非局部应力场,可以是一维或者多维的,不仅取决于 \mathbf{r} 点的应变,而且取决于体内其他所有点的应变.对于这样一个均质各向同性体,线性非局部弹性场理论规定为^[32,35]:

$$\begin{cases} \sigma_{ij,i} + \rho(f_j - \ddot{u}_j) = 0, \sigma_{ij}(\mathbf{r}) = \int_V \alpha(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|, \tau) \sigma'_{ij}(\mathbf{r}') dV(\mathbf{r}'), \\ \sigma'_{ij}(\mathbf{r}') = \lambda e_{kk}(\mathbf{r}') \delta_{ij} + 2\mu e_{ij}(\mathbf{r}'), e_{ij}(\mathbf{r}') = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j(\mathbf{r}')}{\partial r'_i} + \frac{\partial u_i(\mathbf{r}')}{\partial r'_j} \right), \end{cases} \quad (1a \sim d)$$

其中 $\sigma_{ij}(\mathbf{r})$, ρ , f_j 和 u_j 分别为:非局部应力张量、质量密度、体力密度和体内参考点 \mathbf{r} 在 t 时刻的位移矢量, \ddot{u}_j , u_j 对时间 t 的二阶导数是 \mathbf{r} 点的加速度矢量, $i, j = 1$ 或 $i, j = 1, 2$ 或 $i, j = 1, 2, 3$ 取决于相关的维数.

方程(1c)显示了经典的本构关系,其中 \mathbf{r} 点的经典或局部应力张量表示为 $\sigma'_{ij}(\mathbf{r}')$, 和 t 时刻体内任意一点 \mathbf{r} 的线性应变张量 $e_{ij}(\mathbf{r}')$ 有关, λ 和 μ 为 Lamé 常数, δ_{ij} 为 Kronecker 符号.很明显,对于非局部弹性理论,经典或局部的本构关系(1c)被非局部本构关系(1b)取代.根据方程(1b), $\sigma_{ij}(\mathbf{r})$ 在 \mathbf{r} 处的值不仅取决于固定一点的经典局部应力 $\sigma'_{ij}(\mathbf{r}')$, 而是由整个区域 V 中所有点的应力的加权平均值,即体积分.这个权重值由非局部模量 $\alpha(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|, \tau)$ 代表,它又由无量纲纳米尺度参数决定:

$$\tau = \frac{e_0 a}{L}, \quad (2)$$

式中, a 代表材料内部特征长度(比如晶格参数, C-C 键长等), L 代表材料外部特征长度(比如裂纹长度, 波长等), e_0 代表材料特性常数. e_0 的确要根据实验或者可以根据原子晶格动态波的分散曲线拟合来推算.在宏观问题的分析中,当 $\tau \rightarrow 0$ 时,纳米尺度效应变得不再有影响力,则在参考点之外的点($\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'$)的应变可以被忽略,非局部模量成为 Dirac delta 函数,此时 $\sigma_{ij}(\mathbf{r}') = \sigma'_{ij}(\mathbf{r}')$.因此,在纳米尺度效应消失的极端情况下,经典弹性连续介质力学是适用的.

由于存在体积分,非局部弹性问题很难得到数学解析解,但是利用 Green 函数,这个积分方程可以在特定条件的二维区间里转化为一个近似等价的微分连续方程^[32,35]:

$$(1 - \tau^2 L^2 \nabla^2) \sigma_{ij} = \sigma'_{ij}, \quad (3)$$

$\nabla^2 = (\partial/\partial r_k)(\partial/\partial r_k)$ (对 k 求和), 是 Laplace 算子, $i, j, k = 1, 2$. 在二维直角坐标系下, Laplace 算子简化为 $\nabla^2 = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2$.

1.2 非局部纳米梁模型

现在应用上述非局部应力理论来分析考虑具有非局部应力效应的纳米梁.假设给定的 Euler-Bernoulli 纳米梁的横截面积 A , 长度 L , 高 h , 根据 Euler-Bernoulli 梁理论,变形前垂直于中平面的直线变形后依然垂直于变形后的中平面,在此假设基础上,面内位移 $u(x, z, t)$ 和横向位移 $w(x, t)$ 有如下关系:

$$u(x, z, t) = -z \frac{dw(x, t)}{dx}, \quad (4)$$

而应变-位移关系为

$$\varepsilon_{xx} = -z \frac{d^2 w(x, t)}{dx^2}. \quad (5)$$

上述公式中 x 为中平面上并以左端为起点的轴向坐标, z 为偏离中平面的法向坐标, t 为时间, ε_{xx} 为正应变.

根据 1.1 节非局部应力理论和公式(3)所示的近似二维应力模型, 对于一维 Euler-Bernoulli 梁, 考虑非局部效应的简化本构关系可以表示为

$$\sigma_{xx} - \tau^2 L^2 \frac{d^2 \sigma_{xx}}{dx^2} = E \varepsilon_{xx}, \quad (6)$$

式中 τ 为包含了纳米尺度效应的无量纲尺度系数, 由公式(2)给出, E 为弹性模量. 利用下面的无量纲参数

$$\bar{\sigma}_{xx} = \frac{\sigma_{xx}}{E}, \quad \tau = \frac{e_0 a}{L}, \quad \bar{x} = \frac{x}{L}, \quad \bar{z} = \frac{z}{L}, \quad \bar{w} = \frac{w}{L}. \quad (7)$$

可以将公式(6)无量纲化为

$$\bar{\sigma}_{xx} - \tau^2 \bar{\sigma}_{xx}^{(2)} = \varepsilon_{xx}, \quad (8)$$

或者使用公式(5), 则可以表达为

$$\tau^2 \bar{\sigma}_{xx}^{(2)} - \bar{\sigma}_{xx} = \bar{z} \bar{w}_{xx}^{(2)}, \quad (9)$$

上式中 $()^{(n)} = d^n/d\bar{x}^n$, 为对无量纲坐标 \bar{x} 的 n 阶导数. 公式(9)为二阶常微分方程, 其通解可以表示为

$$\bar{\sigma}_{xx} = B_1(\bar{z}) e^{\bar{x}/\tau} + B_2(\bar{z}) e^{-\bar{x}/\tau} + \sum_{n=1}^{\infty} A_n \bar{w}^{(2n)}, \quad (10)$$

上式中 $B_1(\bar{z}), B_2(\bar{z})$ 为齐次方程通解中的系数, 通常为 \bar{z} 的函数; 而最后 1 项为特解. 将式(10)代入式(9)中, 可得到

$$A_n = -\tau^{2(n-1)} \bar{z}. \quad (11)$$

由于 $\tau \rightarrow 0$, 即不考虑非局部效应时, 非局部应力 σ_{xx} 应该等同于经典的局部应力 σ'_{xx} , 也就是 $\lim_{\tau \rightarrow 0} \bar{\sigma}_{xx} = \varepsilon_{xx}$, 于是可以得到 $B_1(\bar{z}) = B_2(\bar{z}) = 0$. 因此, 非局部应力 σ_{xx} 可以表示成

$$\bar{\sigma}_{xx} = - \sum_{n=1}^{\infty} \tau^{2(n-1)} \bar{z} \frac{d^{2n} \bar{w}}{d\bar{x}^{2n}} = \sum_{n=1}^{\infty} \tau^{2(n-1)} \varepsilon_{xx}^{(2(n-1))}. \quad (12)$$

式(12)为考虑非局部效应的非线性本构关系, 首次由 Lim 和 Wang 提出^[48]. 参考经典弯矩的定义, 即 $M_{xx} = \int_A \sigma_{xx} z dA$, 则无量纲化的非局部弯矩则为

$$\bar{M}_{xx} = \frac{M_{xx} L}{EI_{xx}}, \quad (13)$$

并可以进一步表示为

$$\begin{aligned} \bar{M}_{xx} = & - \sum_{n=1}^{\infty} \tau^{2(n-1)} \bar{w}^{(2n)} = \\ & - (\bar{w}^{(2)} + \tau^2 \bar{w}^{(4)} + \tau^4 \bar{w}^{(6)} + \tau^6 \bar{w}^{(8)} + \tau^8 \bar{w}^{(10)} + \dots), \end{aligned} \quad (14)$$

其中 I_{xx} 为截面极惯性矩.

1.3 变分原理与应变能的精确表达式

不管是宏观还是纳观的变形体, 其应变能表达式并不会因为是否考虑非局部效应的影响而改变. 对于本构为式(12)的纳米梁, 应变能密度可以表示为

$$u = \int_0^{\varepsilon_{xx}} \sigma_{xx} d\varepsilon_{xx}. \quad (15)$$

将公式 (12) 代入式(15), 得到

$$u = E \sum_{n=1}^{\infty} \tau^{2(n-1)} \int_0^{\varepsilon_{xx}} \varepsilon_{xx}^{(2(n-1))} d\varepsilon_{xx}. \quad (16)$$

通过积分并整理, 可得

$$u = u_1 + u_2 + u_3, \quad (17)$$

其中

$$\begin{cases} u_1 = \frac{1}{2} E \varepsilon_{xx}^2, & u_2 = \frac{1}{2} E \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} \tau^{2n} (\varepsilon_{xx}^{(n)})^2, \\ u_3 = E \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \tau^{2(n+1)} \sum_{m=1}^n [(-1)^{m+1} \varepsilon_{xx}^{(m)} \varepsilon_{xx}^{(2(n+1)-m)}] \right\}, \end{cases} \quad (18a \sim c)$$

则变形体的应变能可通过应变能密度在整个体积 V 上的积分得到, 即

$$U = \int_V u dV = \int_V (u_1 + u_2 + u_3) dV. \quad (19)$$

下面应用变分原理, 以期望得到平衡方程和边界条件. 对式(19)变分可得

$$\begin{aligned} \delta U = & \int_V (\delta u_1 + \delta u_2 + \delta u_3) dV = \\ & \frac{EI_{xx}}{L} \int_0^1 \left[- \sum_{n=1}^{\infty} (2n-3) \tau^{2(n-1)} \bar{w}^{(2(n+1))} \right] \delta \bar{w} d\bar{x} + \\ & \frac{EI_{xx}}{L} \left[\sum_{n=1}^{\infty} (2n-3) \tau^{2(n-1)} \bar{w}^{(2n+1)} \delta \bar{w} - \sum_{n=1}^{\infty} (2n-3) \tau^{2(n-1)} \bar{w}^{(2n)} \delta \bar{w}^{(1)} + \right. \\ & \sum_{n=1}^{\infty} (2n-1) \tau^{2n} \bar{w}^{(2n+1)} \delta \bar{w}^{(2)} - \sum_{n=1}^{\infty} 2n \tau^{2(n+1)} \bar{w}^{(2(n+1))} \delta \bar{w}^{(3)} + \\ & \sum_{n=1}^{\infty} (2n-1) \tau^{2(n+1)} \bar{w}^{(2n+1)} \delta \bar{w}^{(4)} - \sum_{n=1}^{\infty} 2n \tau^{2(n+2)} \bar{w}^{(2(n+1))} \delta \bar{w}^{(5)} + \\ & \left. \sum_{n=1}^{\infty} (2n-1) \tau^{2(n+2)} \bar{w}^{(2n+1)} \delta \bar{w}^{(6)} + \dots \right]_0^1, \end{aligned} \quad (20)$$

或者表达成为非局部弯矩形式

$$\begin{aligned} \delta U = & \frac{EI_{xx}}{L} \int_0^1 \left[- \bar{M}_{xx}^{(2)} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \tau^{2n} \bar{M}_{xx}^{(2(n+1))} \right] \delta \bar{w} d\bar{x} + \\ & \frac{EI_{xx}}{L} \left[\left(\bar{M}_{xx}^{(1)} - 2 \sum_{n=1}^{\infty} \tau^{2n} \bar{M}_{xx}^{(2n+1)} \right) \delta \bar{w} + \left(- \bar{M}_{xx} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \tau^{2n} \bar{M}_{xx}^{(2n)} \right) \delta \bar{w}^{(1)} - \right. \\ & \left(\tau^2 \bar{M}_{xx}^{(1)} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \tau^{2(n+1)} \bar{M}_{xx}^{(2n+1)} \right) \delta \bar{w}^{(2)} + \left(2\tau^4 \sum_{n=1}^{\infty} \tau^{2(n-1)} \bar{M}_{xx}^{(2n)} \right) \delta \bar{w}^{(3)} - \\ & \left(\tau^4 \bar{M}_{xx}^{(1)} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \tau^{2(n+2)} \bar{M}_{xx}^{(2n+1)} \right) \delta \bar{w}^{(4)} + \left(2\tau^4 \sum_{n=1}^{\infty} \tau^{2n} \bar{M}_{xx}^{(2n)} \right) \delta \bar{w}^{(5)} - \\ & \left. \left(\tau^6 \bar{M}_{xx}^{(1)} + 2\tau^6 \sum_{n=1}^{\infty} \tau^{2n} \bar{M}_{xx}^{(2n+1)} \right) \delta \bar{w}^{(6)} + \dots \right]_0^1. \end{aligned} \quad (21)$$

1.4 新的高阶微分控制方程, 静态弯曲平衡方程和边界条件

对于考虑非局部效应纳米梁的弯曲, 单位长度外载荷 $p = p(x)$, 端部横向作用 $P \big|_{x=0,L}$ 以及端部弯矩 $R \big|_{x=0,L}$ 所做的功 W 可以表达为

$$\begin{aligned}
 W &= \int_0^L p w dx + [Pw]_{x=0}^{x=L} + \left[R \frac{dw}{dx} \right]_{x=0}^{x=L} = \\
 &L^2 \int_0^1 p \bar{w} d\bar{x} + L [P\bar{w}]_{x=0}^{x=1} + [R\bar{w}^{(1)}]_{x=0}^{x=1}. \quad (22)
 \end{aligned}$$

对上式变分可得

$$\delta W = L^2 \int_0^1 p \delta \bar{w} d\bar{x} + L [P\delta \bar{w}]_{x=0}^{x=1} + [R\delta \bar{w}^{(1)}]_{x=0}^{x=1}. \quad (23)$$

定义 1 个能量函数为

$$I = U - W. \quad (24)$$

对该能量函数变分,并利用公式 (21) 和 (23),可得

$$\begin{aligned}
 \delta I &= \delta(U - W) = \\
 &\int_0^1 \left\{ -\frac{EI_{xx}}{L} \left[\sum_{n=1}^{\infty} (2n-3) \tau^{2(n-1)} \bar{w}^{(2(n+1))} \right] - L^2 p \right\} \delta \bar{w} d\bar{x} + \\
 &\frac{EI_{xx}}{L} \left[\left(\bar{M}_{xx}^{(1)} - 2 \sum_{n=1}^{\infty} \tau^{2n} \bar{M}_{xx}^{(2n+1)} - \frac{PL^2}{EI_{xx}} \right) \delta \bar{w} + \right. \\
 &\left(-\bar{M}_{xx} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \tau^{2n} \bar{M}_{xx}^{(2n)} - \frac{RL}{EI_{xx}} \right) \delta \bar{w}^{(1)} - \\
 &\left(\tau^2 \bar{M}_{xx}^{(1)} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \tau^{2(n+1)} \bar{M}_{xx}^{(2n+1)} \right) \delta \bar{w}^{(2)} + \\
 &\left(2\tau^4 \sum_{n=1}^{\infty} \tau^{2(n-1)} \bar{M}_{xx}^{(2n)} \right) \delta \bar{w}^{(3)} - \left(\tau^4 \bar{M}_{xx}^{(1)} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \tau^{2(n+2)} \bar{M}_{xx}^{(2n+1)} \right) \delta \bar{w}^{(4)} + \\
 &\left. \left(2\tau^4 \sum_{n=1}^{\infty} \tau^{2n} \bar{M}_{xx}^{(2n)} \right) \delta \bar{w}^{(5)} - \left(\tau^6 \bar{M}_{xx}^{(1)} + 2\tau^6 \sum_{n=1}^{\infty} \tau^{2n} \bar{M}_{xx}^{(2n+1)} \right) \delta \bar{w}^{(6)} + \dots \right]_0^1. \quad (25)
 \end{aligned}$$

对于稳定状态,变分原理要求能量函数处于 1 个极值,因此

$$\delta I = \delta(U - W) = 0. \quad (26)$$

由于上式对于任意的 $\delta \bar{w}$ 都成立,于是从中可以得到考虑非局部效应的高阶微分控制方程,即

$$- \left[\sum_{n=1}^{\infty} (2n-3) \tau^{2(n-1)} \bar{w}^{(2(n+1))} \right] = \bar{p}, \quad (27)$$

其中 $\bar{p} = pL^3/EI_{xx}$. 上式也可以表达为无量纲形式的非局部弯矩形式

$$-\bar{M}_{xx}^{(2)} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \tau^{2n} \bar{M}_{xx}^{(2(n+1))} = \bar{p}. \quad (28)$$

定义 1 个无量纲形式的等效非局部弯矩

$$\begin{aligned}
 \bar{M}_{ef} &= \bar{M}_{xx} - 2 \sum_{n=1}^{\infty} \tau^{2n} \bar{M}_{xx}^{(2n)} = \sum_{n=1}^{\infty} (2n-3) \tau^{2(n-1)} \bar{w}^{(2n)} = \\
 &-\bar{w}^{(2)} + \tau^2 \bar{w}^{(4)} + 3\tau^4 \bar{w}^{(6)} + 5\tau^6 \bar{w}^{(8)} + 7\tau^8 \bar{w}^{(10)} + \dots, \quad (29)
 \end{aligned}$$

因此,高阶微分控制方程 (28) 可表示为

$$\bar{M}_{ef}^{(2)} = -\bar{p}. \quad (30)$$

由精确变分原理得到的公式 (30),可以通过图 1 所示的考虑非局部应力的微单元的弯矩平衡条件显示出来.

同时,由公式 (25) 所得到的高阶边界条件可以整理为自然边界和几何边界条件的形式. 用位移函数可以表示为

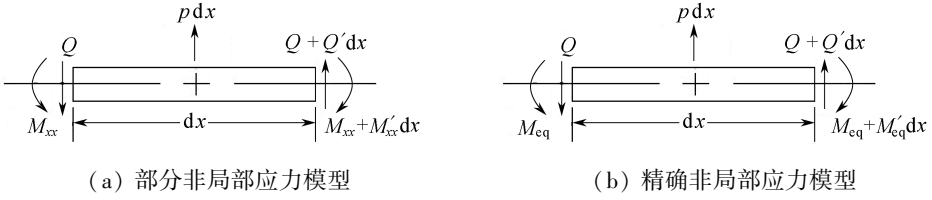


图1 纳米梁单元的静态平衡分析

$$\left. \begin{aligned}
 \sum_{n=1}^{\infty} (2n-3)\tau^{2(n-1)}\bar{w}^{(2n+1)} &= \bar{P} \text{ 或 } \bar{w} = 0, \\
 -\sum_{n=1}^{\infty} (2n-3)\tau^{2(n-1)}\bar{w}^{(2n)} &= \bar{R} \text{ 或 } \bar{w}^{(1)} = 0, \\
 \sum_{n=1}^{\infty} (2n-1)\tau^{2n}\bar{w}^{(2n+1)} &= 0 \text{ 或 } \bar{w}^{(2)} = 0, \\
 -\sum_{n=1}^{\infty} 2n\tau^{2(n+1)}\bar{w}^{(2(n+1))} &= 0 \text{ 或 } \bar{w}^{(3)} = 0, \\
 \sum_{n=1}^{\infty} (2n-1)\tau^{2(n+1)}\bar{w}^{(2n+1)} &= 0 \text{ 或 } \bar{w}^{(4)} = 0, \\
 -\sum_{n=1}^{\infty} 2n\tau^{2(n+2)}\bar{w}^{(2(n+1))} &= 0 \text{ 或 } \bar{w}^{(5)} = 0, \\
 \sum_{n=1}^{\infty} (2n-1)\tau^{2(n+2)}\bar{w}^{(2n+1)} &= 0 \text{ 或 } \bar{w}^{(6)} = 0, \\
 \vdots & \\
 \bar{x} &= 0, 1
 \end{aligned} \right\} \quad (31a)$$

其中 $\bar{P} = PL^2/EI_{xx}$ 和 $\bar{R} = RL/EI_{xx}$ 分别为无量纲化后的端部载荷和端部弯矩。用非局部弯矩则可以表示为

$$\left. \begin{aligned}
 \bar{M}_{xx}^{(1)} - 2\sum_{n=1}^{\infty} \tau^{2n}\bar{M}_{xx}^{(2n+1)} &= \bar{M}_{ef}^{(1)} = \bar{P} \text{ 或 } \bar{w} = 0, \\
 -\bar{M}_{xx} + 2\sum_{n=1}^{\infty} \tau^{2n}\bar{M}_{xx}^{(2n)} &= -\bar{M}_{ef} = \bar{R} \text{ 或 } \bar{w}^{(1)} = 0, \\
 \tau^2\bar{M}_{xx}^{(1)} + 2\sum_{n=1}^{\infty} \tau^{2(n+1)}\bar{M}_{xx}^{(2n+1)} &= -\tau^2(\bar{M}_{ef}^{(1)} - 2\bar{M}_{xx}^{(1)}) = 0 \text{ 或 } \bar{w}^{(2)} = 0, \\
 2\tau^4\sum_{n=1}^{\infty} \tau^{2(n-1)}\bar{M}_{xx}^{(2n)} &= \tau^4(\bar{M}_{ef}^{(2)} - 3\bar{M}_{xx}^{(2)}) = 0 \text{ 或 } \bar{w}^{(3)} = 0, \\
 \tau^4\bar{M}_{xx}^{(1)} + 2\sum_{n=1}^{\infty} \tau^{2(n+2)}\bar{M}_{xx}^{(2n+1)} &= -\tau^4(\bar{M}_{ef}^{(1)} - 2\bar{M}_{xx}^{(1)}) = 0 \text{ 或 } \bar{w}^{(4)} = 0, \\
 2\tau^4\sum_{n=1}^{\infty} \tau^{2n}\bar{M}_{xx}^{(2n)} &= \tau^6(\bar{M}_{ef}^{(2)} - 3\bar{M}_{xx}^{(2)}) = 0 \text{ 或 } \bar{w}^{(5)} = 0, \\
 \tau^6\bar{M}_{xx}^{(1)} + 2\tau^{2n}\sum_{n=1}^{\infty} \tau^{2n}\bar{M}_{xx}^{(2n+1)} &= -\tau^6(\bar{M}_{ef}^{(1)} - 2\bar{M}_{xx}^{(1)}) = 0 \text{ 或 } \bar{w}^{(6)} = 0, \\
 \vdots & \\
 \bar{x} &= 0, 1
 \end{aligned} \right\} \quad (31b)$$

在同一行中,或者左边的自然边界等于 0,或者右边的几何边界条件等于 0,而不会存在自然边界和几何边界同时等于 0 的情况。

为得到静态平衡方程,可以考虑图 1 所示的纳米梁微单元,图 1(a)为部分考虑非局部效应下的平衡条件,图 1(b)为考虑非局部效应下的精确平衡条件,其中的 \bar{M}_{ef} 为公式(29)定义的无量纲非局部弯矩。

对于以上两种模型,竖直方向的平衡条件会产生相同的条件:

$$\bar{Q}^{(1)} + \bar{p} = 0, \tag{32}$$

其中

$$\bar{Q} = \frac{QL^2}{EI_{xx}} \tag{33}$$

定义了无量纲剪切力,而 Q 为剪切力。图 1(a)和图 1(b)中的弯矩平衡条件是相似的,但是前者是用 \bar{M}_{xx} 表达,而后者则用 \bar{M}_{ef} 表达。对这两个条件进行微分,并且利用公式(33),一个则可以得到公式(30)所示的微分控制方程,而另一个则得到不正确的微分方程。因此可以看出,对于一个非局部应力单元,真正的弯矩平衡应该是由一个等效非局部弯矩建立的,而不是像图 1(a)那样,直接用一个非局部弯矩代替经典弯矩。从公式(30)和(32)可见,含有高阶非局部效应的静态平衡方程为

$$\bar{Q}^{(1)} + \bar{p} = 0, \bar{M}_{ef}^{(1)} - \bar{Q} = 0. \tag{34a, b}$$

对于纳米梁自由端,公式(31a, b)可以给出如下边界条件

$$\begin{cases} \bar{M}_{ef}^{(1)} |_{\bar{x}=0,1} = \bar{Q} |_{\bar{x}=0,1} = \bar{P}, -\bar{M}_{ef} |_{\bar{x}=0,1} = \bar{R}, -\tau^2(\bar{M}_{ef}^{(1)} - 2\bar{M}_{xx}^{(1)}) |_{\bar{x}=0,1} = 0, \\ \tau^4(\bar{M}_{ef}^{(2)} - 3\bar{M}_{xx}^{(2)}) |_{\bar{x}=0,1} = 0, -\tau^4(\bar{M}_{ef}^{(1)} - 2\bar{M}_{xx}^{(1)}) |_{\bar{x}=0,1} = 0, \\ \vdots \end{cases} \tag{35}$$

可以看出,剪切力、等效非局部弯矩以及其他自然边界条件等于 0。而对于简支端,则有如下几何边界条件:

$$\bar{w} |_{\bar{x}=0,1} = \bar{w}^{(2)} |_{\bar{x}=0,1} = \bar{w}^{(4)} |_{\bar{x}=0,1} = \dots = 0 \tag{36a}$$

以及自然边界条件

$$\begin{cases} -\bar{M}_{ef} |_{\bar{x}=0,1} = \bar{R}, \\ \left[2\tau^4 \sum_{n=1}^{\infty} \tau^{2(n-1)} \bar{M}_{xx}^{(2n)} \right] |_{\bar{x}=0,1} = \tau^4(\bar{M}_{ef}^{(2)} - 3\bar{M}_{xx}^{(2)}) |_{\bar{x}=0,1} = 0, \\ \vdots \end{cases} \tag{36b}$$

同样,对于固支端的边界条件为

$$\bar{w} |_{\bar{x}=0,1} = \bar{w}^{(1)} |_{\bar{x}=0,1} = \bar{w}^{(2)} |_{\bar{x}=0,1} = \bar{w}^{(3)} |_{\bar{x}=0,1} = \bar{w}^{(4)} |_{\bar{x}=0,1} = \dots = 0. \tag{37}$$

可以看出变形、变形梯度、转角以及其他所有的几何边界条件都等于 0。对于高阶自然边界条件的物理意义的理解还不确定,还需要进一步地研究。

更一般的,公式(31a, b)和(35)~(37)中所示的边界条件并不会同时完全等于 0。对于端部 $\bar{x} = 0, 1$ 处具体的点载荷、点力偶、位移、位移梯度以及指定的高阶载荷/弯矩或位移梯度,可以用具体值代替 0。

有意思的是,高阶非局部效应只存在于弯矩平衡公式(34b)中,而剪切力平衡公式(34a)中却没有。这是因为由于弯矩是从公式(1b)中对面内非局部应力分量得到的,而这是二维非局部理论中很重要的一点。当把非局部应力简化为公式(6)时,我们其实已经隐式地采用 Erin-

gen^[32,35]中关于二维域的假设.因此,面外方向的垂直于中平面的剪切力则不由公式(6)控制,故而没有非局部效应存在.若同时考虑面内和面外的非局部效应,则公式(6)变得不可使用了,此时应该采用原始非局部应力模型,见公式(1a~d),并代以三维核函数^[32,35],利用 Green 函数进行求解.因此,考虑了面内二维非局部应力和横截面内二维剪应力的文章都普遍采用 Timoshenko 模型实际上是不严格的,也导致了其最后的结论和原始的非局部应力模型^[32,35]相比是值得怀疑的.

通过变分原理,得到了非局部高阶微分控制方程(27)和(28),相应的边界条件(31a,b),以及非局部高阶平衡条件.在下面的分析中,这些新的方程和公式不仅被用来解决以前颇为疑惑的问题,还纠正了以前存在的建立在非局部应力模型基础上的所有碳纳米管、纳米梁、纳米板以及纳米壳的模型及结果.

2 悬臂纳米梁在端部点载荷作用下的弯曲精确解

在这里我们考虑一个经典的例子来说明非局部纳观尺度效应的影响.在这个例子中讨论了之前的奇怪预测,那就是悬臂纳米梁在端部集中荷载的作用下没有任何的非局部影响.例子中一些常用的分子和纳米管的取值为:C-C 的键长为 $a = 0.12 \text{ nm}$,纳米梁的长度为 $L = 10 \text{ nm}$,取 $e_0 = 0 \rightarrow 1.67$,则纳观尺度参数为 $\tau = 0 \rightarrow 0.02$.在一些数值实例中, τ 的取值对于纳米梁来说既不常用也不可能.在这些例子中,采用 $5 \leq L/a \leq 55$ 和 $e_0 = 1$,在极端情况下,如果取 $L/a = 5$ 则有 $\tau = 0.2$,采用这些例子的目的仅仅是为了做比较.

对于自由端部弯矩 $\bar{R}_{\bar{x}=1} = 0$,而横向载荷 $\bar{P}_{\bar{x}=1} = \bar{P}_0$ 的悬臂纳米梁(CF),其中 \bar{P}_0 是在 $\bar{x} = 1$ 处的无量纲载荷,其表达式为

$$\bar{P}_0 = \frac{P_0 L^2}{EI_{xx}}. \quad (38)$$

非局部高阶控制微分方程(27)为

$$- \left[\sum_{n=1}^{\infty} (2n-3) \tau^{2(n-1)} \bar{w}^{(2(n+1))} \right] = 0. \quad (39)$$

保留前两项,上述方程变成

$$- \tau^2 \bar{w}^{(6)} + \bar{w}^{(4)} = 0. \quad (40)$$

上述的 6 阶微分方程的解仅由齐次通解组成,这个解可以表达为

$$\bar{w} = C_0 + C_1 \bar{x} + C_2 \bar{x}^2 + C_3 \bar{x}^3 + C_4 e^{\bar{x}/\tau} + C_5 e^{-\bar{x}/\tau}, \quad (41)$$

其中 $C_i (i = 0, 1, 2, \dots, 5)$ 是积分常数.从公式(35)和(37)可知,对于一边固端一边自由支撑条件,其边界条件为了与控制方程一致只需取到 τ^2 项,所以在固定端 $\bar{x} = 0$ 处为

$$\bar{w} |_{\bar{x}=0} = \bar{w}^{(1)} |_{\bar{x}=0} = \bar{w}^{(2)} |_{\bar{x}=0} = 0; \quad (42a)$$

在自由端 $\bar{x} = 1$ 处为

$$\begin{cases} [\tau^2 \bar{w}^{(5)} - \bar{w}^{(3)}]_{\bar{x}=1} = \bar{Q} |_{\bar{x}=1} = \bar{P}_0, \\ [-\tau^2 \bar{w}^{(4)} + \bar{w}^{(2)}]_{\bar{x}=1} = -\bar{M}_{ef} |_{\bar{x}=1} = 0, \\ \tau^2 [3\tau^2 \bar{w}^{(5)} + \bar{w}^{(3)}]_{\bar{x}=1} = 0. \end{cases} \quad (42b)$$

将公式(41)代入公式(42a,b)中,可以求得积分常数为

$$\begin{cases} C_0 = \tau^2 \bar{P}_0, C_1 = \frac{\tau(2 - \tau e^{1/\tau} - 2e^{2/\tau})}{2(1 + e^{2/\tau})} \bar{P}_0, C_2 = \frac{1}{2} \bar{P}_0, \\ C_3 = -\frac{1}{6} \bar{P}_0, C_4 = -\frac{\tau^2(4 - \tau e^{1/\tau})}{4(1 + e^{2/\tau})} \bar{P}_0, C_5 = -\frac{\tau^2(4e^{1/\tau} + \tau)}{4(1 + e^{2/\tau})} \bar{P}_0, \end{cases} \quad (43)$$

因此,悬臂纳米梁在端部集中荷载 $\bar{p}|_{\bar{x}=1} = \bar{P}_0$ 的作用下,利用非局部应力模型求得的通解为

$$\bar{w} = \frac{\bar{P}_0}{12} \left[6\bar{x}^2 - 2\bar{x}^3 + \frac{6\tau(2 - \tau e^{1/\tau} - 2e^{2/\tau})}{1 + e^{2/\tau}} \bar{x} + 12\tau^2 - \frac{3\tau^2(4 - \tau e^{1/\tau})}{1 + e^{2/\tau}} e^{\bar{x}/\tau} - \frac{3\tau^2(4e^{1/\tau} + \tau)}{1 + e^{2/\tau}} e^{(1-\bar{x})/\tau} \right]. \quad (44)$$

因为在公式(40)中只保留前两项,为了保持一致,从公式(14)得到的无量纲弯矩近似为

$$\bar{M}_{xx} = -\bar{P}_0 \left[1 - \bar{x} - \frac{4 - \tau e^{1/\tau}}{2(1 + e^{2/\tau})} e^{\bar{x}/\tau} - \frac{4e^{1/\tau} + \tau}{2(1 + e^{2/\tau})} e^{(1-\bar{x})/\tau} \right]. \quad (45)$$

将公式(45)代入公式(29),可以得到无量纲等效非局部弯矩的前两项为

$$\bar{M}_{ef} = -\bar{w}^{(2)} + \tau^2 \bar{w}^{(4)} = -\bar{P}_0(1 - \bar{x}), \quad (46)$$

或者利用 $\bar{p} = 0$ 和边界条件 $\bar{Q}|_{\bar{x}=1} = \bar{M}_{ef}^{(1)}|_{\bar{x}=1} = \bar{P}_0$ 和 $-\bar{M}_{ef}|_{\bar{x}=1} = 0$, 将静力平衡条件公式(34a, b)积分2次.

最大横向变形发生在自由端 $\bar{x} = 1$ 处,而最大的弯矩和等效非局部弯矩发生在固定端 $\bar{x} = 0$ 处.其表达式分别为

$$\bar{w}_{\max} = \frac{\bar{P}_0}{12} \left[4 + 12\tau^2 + \frac{3\tau(4 - \tau^2)(1 - e^{2/\tau}) - 30\tau^2 e^{1/\tau}}{1 + e^{2/\tau}} \right], \quad (47)$$

$$(\bar{M}_{xx})_{\max} = -\bar{P}_0, \quad (48)$$

$$(\bar{M}_{ef})_{\max} = -\bar{P}_0. \quad (49)$$

纳观尺度参数 τ 对表达式为式(44) 的无量纲静力变形 \bar{w} 的影响如图2所示.图中, τ 从0变化到0.02,当 $\tau = 0$ 时为经典的或者是局部梁的解.从图中可以看出,增加纳观尺度 τ 会减小纳米梁的静力变形.因此,经典的局部应力场理论过高估计了纳米梁的静力变形.

利用部分非局部应力模型^[36,48] 分析了同样承受端部集中荷载的悬臂纳米梁.在标准化参数后,无量纲化的变形表达式分别为^[36]

$$\bar{w} = \frac{\bar{P}_0}{6} (3\bar{x}^2 - \bar{x}^3) \quad (50)$$

和^[48]

$$\bar{w} = \frac{\bar{P}_0}{6} \left[3\bar{x}^2 - \bar{x}^3 + 6\tau \left(\cot \frac{1}{\tau} \right) \bar{x} - 6\tau^2 \left(1 + \cot \frac{1}{\tau} \sin \frac{\bar{x}}{\tau} - \cos \frac{\bar{x}}{\tau} \right) \right]. \quad (51)$$

公式(50)表明通过部分非局部应力模型^[36] 得到的无量纲变形导致了1个非常迷惑的弯曲解,即悬臂纳米梁利用非局部应力弹性场理论模型^[32,35] 得到的解和经典悬臂梁的解是一样的,不受纳观尺度效应的影响.可以断定这样的悬臂纳米梁在非局部应力场中表现出好像没有非局部应力效应一样.下一个部分将会说明受均布荷载的悬臂纳米梁利用部分非局部应力模型是会表现出纳观尺度效应的.这样就有点令人迷惑了,因为集中荷载在1个很有限的区域内是可以看成均布荷载作用的.因此,对于有限区域的均布荷载(实际上是集中荷载)和理论上完美的集中荷载,部分非局部应力模型会导致1个奇怪的和不连续的解.

此外,比较公式(50)、(51)和公式(44),可以很明显的看出部分非局部应力模型预测 \bar{w} 随

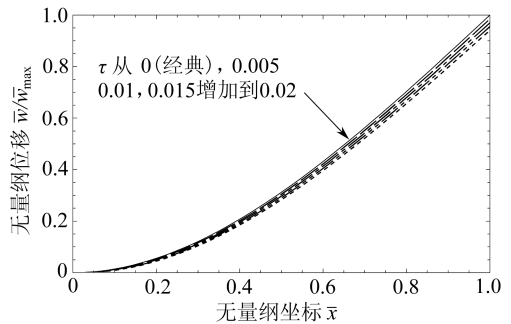


图2 悬臂纳米梁在集中力 $P|_{\bar{x}=1} = P_0$ 作用下 τ 对 \bar{w}/\bar{w}_{\max} 的影响

着 τ 的增加而增加,与精确的非局部应力模型得出的结论相反。

3 进一步讨论

3.1 二维非局部模型中核函数的适用性

需要注意的是,被广泛使用的非局部应力模型的常微分方程,即

$$(1 - \tau^2 L^2 \nabla^2) \sigma_{ij} = \sigma'_{ij} \quad (3)$$

是通过在弹性场方程 (1b) 中为核函数假设 1 个二维的非局部系数,并且将模型误差减少到 6%^[32,35] 的基础上得到的。因此,该非局部应力表达式只对二维空间中的二维非局部应力场有效,应用在纳米梁或者纳米板的中平面上是合理的。然而如果将该二维非局部应力应用于厚梁的中平面,则需要进一步的严格判断,比如弯曲变形和剪切变形相互耦合的 Timoshenko 梁。而直接的耦合两个二维域的非局部的模型也是值得怀疑的。即便是可以耦合的话,因为不同的原子以及它们各项异性意味着非局部纳米效应常数 $\tau = e_0 a/L$ 对于某一个特定的剪切校正系数也应该是各项异性的。

3.2 近似非局部应变梯度模型的适用性

许多文章采用如下的近似非局部应变梯度模型:

$$\sigma_x = E \left[\varepsilon_{xx} + (e_0 a)^2 \frac{\partial^2 \varepsilon_{xx}}{\partial x^2} \right] \text{ 或 } \bar{\sigma}_x = \varepsilon_{xx} + \tau^2 \frac{\partial^2 \varepsilon_{xx}}{\partial x^2}. \quad (52a, b)$$

对比式 (52b) 和 (8),发现该非局部近似模型将 Eringen^[32,35] 定义的高阶非局部应力项 (见式 (1c) 和 (3)), 作为经典理论中的应力

$$\frac{\partial^2 \bar{\sigma}_{xx}}{\partial x^2} \approx \frac{\partial^2 \bar{\sigma}'_{xx}}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 \varepsilon_{xx}}{\partial x^2}. \quad (53)$$

进一步比较式 (52b) 和 (12), 上述的近似其实等效于截留了非局部应力二阶常微分方程式 (12) 的解中的两项,因此,这样的近似模型虽然并不是无效的,但是,在应用的时候应该注意到它仅在 τ^2 阶次上的近似有效。

3.3 基于部分与精确非局部应力模型非局部的纳米尺度效应

目前几乎所有已发表的研究非局部纳米结构静态或动态下力学行为的文章都是基于部分非局部应力模型。这些论文应用了不同的分析方法,涉及了广泛的课题,包括弯曲、振动、屈曲以及波传导问题。这些问题看似相互独立,但是都可以直接或者间接地追溯到同一个模型,即图 1(a) 所示的考虑了部分非局部效应的经典平衡模型。该模型不经意间忽略了纳米结构的非局部弯矩中的高阶非局部效应,使得纳观单元并不处于一个静止或动态的平衡,也就是说图 1(a) 中的模型并不是一个平衡的状态。在以往考虑部分非局部纳观单元的平衡状态时,通过直接定义经典弯矩为非局部弯矩,作为对经典的平衡状态下的一种拓展,而不必严格证明这种概括是否真实有效。而在本文中,对弯矩平衡方程最完美的拓展则是通过一个有效非局部弯矩代替原来的非局部弯矩,因为其中包含了高阶微分项,见公式 (29) 和图 1(b)。

对于受到荷载 p 作用的纳米梁,部分非局部应力模型的微分控制方程为^[48]

$$\sum_{n=1}^{\infty} \tau^{2(n-1)} \bar{w}^{(2(n+1))} = \bar{p}, \quad (54a)$$

或者保留前两项为^[36,48]

$$\tau^2 \bar{w}^{(6)} + \bar{w}^{(4)} = \bar{p}. \quad (54b)$$

然而精确非局部应力模型的控制方程则为

$$- \left[\sum_{n=1}^{\infty} (2n - 3) \tau^{2(n-1)} \bar{w}^{(2(n+1))} \right] = \bar{p}, \quad (27)$$

或者保留前两项为

$$- \tau^2 \bar{w}^{(6)} + \bar{w}^{(4)} = \bar{p}. \quad (55)$$

通过比较公式(54b)和(55),明显发现在考虑由 $\tau = e_0 a/L$ 表征的纳观尺度效应时,部分非局部应力模型预测的结果和精确应力模型相反.对于同样纳观尺度效应,前者模型得到的静态变形偏大,而后者得到的静态变形偏小,或者等效地说材料的刚度增加了.

刚度随着纳观尺度效应的增加而增加的结论与一些通过其他的非局部弹性方法得到的结论相一致,例如利用应变梯度理论的文献[38-39];研究单臂碳纳米管和双臂碳纳米管自由振动的分子结构力学方法的文献[40],该文章中总结出基本频率的经典结果明显比分子模型得到的结果低40%到60%;修正的耦合应力理论^[41-43].这些结论进一步被试验所支持,如(i)结构优化的微观层薄膜比单体模具有更高的拉升强度^[44]; (ii)晶体材料纳米压痕硬度明显增加^[38]; (iii)纳米悬臂梁的弯曲刚度随着厚度的减少而明显增加^[39,45].分子动力学对波传导^[46]和屈曲问题^[47]的模拟结果也显示了刚度增强结论.

4 结 论

本文通过精确非局部应力场模型和严格的变分计算,证明了纳米梁弯曲问题中3个关键但是又被忽略的问题:(i)在所有的研究中,存在着随着非局部效应的增加,纳米结构的刚度也在增加,也就是静态下的弯曲变形减小,而根据非局部场理论,这也是符合物理本质的.(ii)纳观尺度效应在纳米梁的弯曲结论中都存在,这一点是不容置疑的,即所有纳米梁的弯曲结论都受到非局部应力的影响.此外,当非局部效应趋于0时,将会得到经典的弯曲结论.(iii)可得到和高阶微分控制方程相一致的高阶边界条件.

此外,本文推导出新的平衡方程,其中包含了被部分非局部应力模型所忽略的高阶非局部项,同时也得到了高阶微分控制方程和高阶边界条件.曾经被广泛应用于部分非局部应力模型中的平衡条件其实并不真正的处于平衡状态,但是若将其中的非局部弯曲代替为一个等效非局部弯矩,则可以得到完整的平衡条件.

目前纳米梁的振动和屈曲分析仍在进行中,虽然新结果悬而未决,但是可以预知随着纳观尺度应力效应的增加,纳米梁的刚度也增加,即自然振动的频率将会增加,而屈曲载荷将会减小.

致谢 本文工作由香港特别行政区研究资助委员会(RGC HKSAR, City U117406)资助;同时特别感谢山东大学牛军川博士的宝贵意见及相关协助,感谢杨洋、徐瑞、余育苗的翻译工作.

参考文献:

- [1] Iijima S. Helical microtubules of graphitic carbon[J]. *Nature*, 1991, **354**: 56-58.
- [2] Treacy M M J, Ebbesen T W, Gibson T M. Exceptionally high Young's modulus observed for individual carbon nanotubes[J]. *Nature*, 1996, **381**: 680-687.
- [3] Ball P. Roll up for the revolution[J]. *Nature*, 2001, **414**: 142-144.
- [4] Iijima S, Brabec C, Maiti A, et al. Structural flexibility of carbon nanotubes[J]. *J Chem Phys*, 1996, **104**: 2089-2092.

- [5] Yakobson B I, Campbell M P, Brabec C J, *et al.* High strain rate fracture and C-chain unraveling in carbon nanotubes[J]. *Comput Mater Sci*, 1997, **8**: 341-348.
- [6] He X Q, Kitipornchai S, Liew K M. Buckling analysis of multi-walled carbon nanotubes: a continuum model accounting for Van der Waals interaction[J]. *J Mech Phys Solids*, 2005, **53**: 303-326.
- [7] Yakobson B I, Brabec C J, Bernholc J. Nanomechanics of carbon tubes: instabilities beyond linear range[J]. *Phys Rev Lett*, 1996, **76**: 2511-2514.
- [8] Ru C Q. Effective bending stiffness of carbon nanotubes[J]. *Phys Rev B*, 2000, **62**: 9973-9976.
- [9] Ru C Q. Elastic buckling of single-walled carbon nanotubes ropes under high pressure[J]. *Phys Rev B*, 2000, **62**: 10405-10408.
- [10] Zhang P, Huang Y, Geubelle P H, *et al.* The elastic modulus of single-wall carbon nanotubes: a continuum analysis incorporating interatomic potentials[J]. *I J Solids Struct*, 2002, **39**: 3893-3906.
- [11] Gurtin M E, Murdoch A. A continuum theory of elastic material surfaces[J]. *Archives of Rational Mechanics and Analysis*, 1975, **57**: 291-323.
- [12] Gurtin M E, Murdoch A I. Effect of surface stress on wave propagation in solids[J]. *J Appl Phys*, 1976, **47**: 4414-4421.
- [13] He L H, Lim C W. On the bending of unconstrained thin crystalline plates caused by change in surface stress[J]. *Surface Sci*, 2001, **478**(3): 203-210.
- [14] He L H, Lim C W, Wu B S. A continuum model for size-dependent deformation of elastic films of nano-scale thickness[J]. *I J Solids Struct*, 2004, **41**: 847-857.
- [15] Lim C W, He L H. Size-dependent nonlinear response of thin elastic films with nano-scale thickness[J]. *I J Mech Sci*, 2004, **46**(11): 1715-1726.
- [16] Lim C W, Li Z R, He L H. Size dependent, nonuniform elastic field inside a nano-scale spherical inclusion due to interface stress[J]. *I J Solids Struct*, 2006, **43**: 5055-5065.
- [17] Wang Z Q, Zhao Y P, Huang Z P. The effects of surface tension on the elastic properties of nano structures[J]. *I J Engineering Science*, 2009. doi:10.1016/j.ijengsci.2009.07.007
- [18] Eringen A C. Linear theory of nonlocal elasticity and dispersion of plane waves[J]. *I J Engineering Science*, 1972, **10**(5): 425-435.
- [19] Eringen A C. Nonlocal polar elastic continua[J]. *I J Engineering Science*, 1972, **10**(1): 1-16.
- [20] Eringen A C. On nonlocal fluid mechanics[J]. *I J Engineering Science*, 1972, **10**(6): 561-575.
- [21] Eringen A C, Edelen D G B. On nonlocal elasticity[J]. *I J Engineering Science*, 1972, **10**(3): 233-248.
- [22] Eringen A C. Linear theory of nonlocal microelasticity and dispersion of plane waves[J]. *Lett Appl Engng Sci*, 1973, **1**(2): 129-146.
- [23] Eringen A C. On nonlocal microfluid mechanics[J]. *I J Engineering Science*, 1973, **11**(2): 291-306.
- [24] Eringen A C. Theory of nonlocal electromagnetic elastic solids[J]. *J Math Phys*, 1973, **14**(6): 733-740.
- [25] Eringen A C. Theory of nonlocal thermoelasticity[J]. *I J Engineering Science*, 1974, **12**: 1063-1077.
- [26] Eringen A C. Memory-dependent nonlocal thermoelastic solids[J]. *Lett Appl Engng Sci*, 1974, **2**(3): 145-149.
- [27] Eringen A C. Memory dependent nonlocal elastic solids[J]. *Lett Appl Engng Sci*, **2**(3): 145-

- 159.
- [28] Eringen A C. Nonlocal elasticity and waves[C]//Thoft-Christensen P. *Continuum Mechanics Aspect of Geodynamics and Rock Fracture Mechanics*. Netherlands: Kluwer Academic Publishers Group, 1974:81-105.
- [29] Eringen A C. *Continuum Physics*[M]. Vol II ,Sect 1. 3. New York: Academic Press, 1975.
- [30] Eringen A C. *Nonlocal Polar Field Theories*[M]. New York: Academic, 1976.
- [31] Eringen A C. *Mechanics of Continua*[M]. 2nd ed. Melbourne, FL: Krieger, 1980.
- [32] Eringen A C. On differential equations of nonlocal elasticity and solutions of screw dislocation and surface waves[J]. *J Appl Phys*, 1983, **54**(9) : 4703-4710.
- [33] Eringen A C. Theory of nonlocal piezoelectricity[J]. *J Math Phys*, 1984, **25**(3) : 717-727.
- [34] Eringen A C. Point charge, infrared dispersion and conduction in nonlocal piezoelectricity [C]//Maugin G A. *The Mechanical Behavior of Electromagnetic Solid Continua*. North-Holland; Elsevier Science, 1984:187-196.
- [35] Eringen A C. *Nonlocal Continuum Field Theories*[M]. New York: Springer, 2002.
- [36] Peddieson J, Buchanan G R, McNitt R P. Application of nonlocal continuum models to nanotechnology[J]. *I J Engineering Science*, 2003, **41**(3/5) : 305-312.
- [37] Sudak L J. Column buckling of multiwalled carbon nanotubes using nonlocal continuum mechanics[J]. *J Appl Phys*, 2003, **94**(11) : 7281-7287.
- [38] Nix W, Gao H. Indentation size effects in crystalline materials: a law for strain gradient plasticity[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1998, **46**(3) : 411-425.
- [39] Lam D C C, Yang F, Chong A C M, et al. Experiments and theory in strain gradient elasticity [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2003, **51**: 1477-1508.
- [40] Li C Y, Chou T W. Vibrational behaviors of multi-walled carbon nanotube-based nanomechanical resonators[J]. *Appl Phys Lett*, 2004, **84**: 121-123.
- [41] Park S K, Gao X-L. Bernoulli-Euler beam model based on a modified couple stress theory[J]. *Journal of Micromechanics and Microengineering*, 2006, **16**: 2355-2359.
- [42] Park S K, Gao X-L. Variational formulation of a modified couple stress theory and its application to a simple shear problem[J]. *Z Angew Math Phys*, 2008, **59**: 904-917.
- [43] Ma H M, Gao X-L, Reddy J N. A microstructure-dependent Timoshenko beam model based on a modified couple stress theory[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2008, **56**(12) : 3379-3391.
- [44] Was G S, Foecke T. Deformation and fracture in microlaminates[J]. *Thin Solid Films*, 1996, **286**: 1-31.
- [45] McFarland A W, Colton J S. Role of material microstructure in plate stiffness with relevance to microcantilever sensors [J]. *Journal of Micromechanics and Microengineering*, 2005, **15**: 1060-1067.
- [46] Liew K M, Hu Y G, He X Q. Flexural wave propagation in single-walled carbon nanotubes[J]. *J Computational and Theoretical Nanoscience*, 2008, **5**: 581-586.
- [47] Zhang Y Y, Wang C M, Duan W H, et al. Assessment of continuum mechanics models in predicting buckling strains of single-walled carbon nanotubes[J]. *Nanotechnology*, 2009, **20**, 395707.
- [48] Lim C W, Wang C M. Exact variational nonlocal stress modeling with asymptotic higher-order strain gradients for nanobeams[J]. *Journal of Applied Physics*, 2007, **101**, 054312.

On the Truth of Nanoscale for Nanobeams Based on Nonlocal Elastic Stress Field Theory: Equilibrium, Governing Equation and Static Deflection

C. W. Lim

*(Department of Building and Construction, City University of Hong Kong,
Tat Chee Avenue, Kowloon, Hong Kong, P. R. China)*

Abstract: This paper has successfully addressed three critical but overlooked issues in nonlocal elastic stress field theory for nanobeams: (i) why does the presence of increasing nonlocal effects induce reduced nanostructural stiffness in many, but not consistently for all, cases of study, i. e. increasing static deflection, decreasing natural frequency and decreasing buckling load, although physical intuition according to the nonlocal elasticity field theory first established by Eringen tells otherwise? (ii) the intriguing conclusion that nanoscale effects are missing in the solutions in many exemplary cases of study, eg. bending deflection of a cantilever nanobeam with a point load at its tip; and (iii) the non-existence of additional higher-order boundary conditions for a higher-order governing differential equation. Applying the nonlocal elasticity field theory in nanomechanics and an exact variational principal approach, the new equilibrium conditions, domain governing differential equation and boundary conditions for bending of nanobeams were derived. These equations and conditions involved essential higher-order differential terms which were opposite in sign with respect to the previous studies in statics and dynamics of nonlocal nano-structures. The difference in higher-order terms resulted in reverse trends of nanoscale effects with respect to the conclusion. Effectively, this paper reported new equilibrium conditions, governing differential equation and boundary conditions and the true basic static responses for bending of nanobeams. It also concludes that the widely accepted equilibrium conditions of nonlocal nanostructures are in fact not in equilibrium, but they can be made perfect should the nonlocal bending moment be replaced by an effective nonlocal bending moment. The conclusions above were substantiated, in a general sense, by other approaches in nanostructural models such as strain gradient theory, modified couple stress models and experiments.

Key words: bending; effective nonlocal bending moment; nanobeam; nanomechanics; nanoscale; nonlocal elastic stress; strain gradient