

考虑非局部剪切效应的碳纳米管 弯曲特性研究*

尹春松, 杨 洋

(昆明理工大学 工程力学系, 昆明 650051)

摘要: 基于 Hamilton(哈密顿)变分原理和非局部连续介质弹性理论,建立了新型非局部 Timoshenko(铁木辛柯)梁模型(ANT),推导了碳纳米管(CNT)的 ANT 弯曲平衡方程以及两端简支梁、悬臂梁和简支-固定梁的边界条件表达式,分析了剪切变形效应和非局部微观尺度效应对碳纳米管弯曲特性的影响.数值计算结果显示,碳纳米管的弯曲刚度随着小尺度效应的增强而升高.其次,这种小尺度效应对自由端受集中力的悬臂梁碳纳米管有明显作用,其刚度变化规律和其它约束条件的碳纳米管一样,这一点是 ANT 模型区别于普通非局部纳米梁模型的主要特点.经分子动力学模拟验证,ANT 模型是合理分析碳纳米管力学特性的有效方法.

关键词: Hamilton 原理; 非局部应力; 碳纳米管; Timoshenko 梁; 弯曲特性

中图分类号: O324; TB332 **文献标志码:** A

doi: 10.3879/j.issn.1000-0887.2015.06.004

引 言

碳纳米管被发现后,理论和实验都证明其具有优异的力学物理性能,其应用前景不可估量.在过去的 20 年间,关于碳纳米管的研究,成为材料学和凝聚态物理学领域的一大热点.针对碳纳米管的化学制备与改性,以及力、热、光、电等物理性质的研究报道层出不穷^[1-4].碳纳米管的弯曲性能,是纳米科学研究的重点,对碳纳米管工程应用有着重要的指导意义^[1-4].在研究碳纳米管弯曲性能的诸多方法中,实验手段由于实际操作和精度控制方面有很大困难,应用受到限制^[4].因此,关于碳纳米管弯曲性能的理论计算方法,成为了纳米力学领域的研究重点.

分子动力学模拟是目前纳米学科领域得到普遍认可的分析手段,对于碳纳米管的弯曲特性也是如此^[5].然而,分子动力学模拟程序计算量很大,对于尺度较大、结构较复杂的形体,分子动力学模拟方法的计算效率难以令人满意.这就使得连续介质力学模型成为研究碳纳米管力学特性的有效方法.基于连续介质梁模型和壳模型的碳纳米管弯曲性能研究中,比较有代表性的报道为 Ru 应用经典 Euler(欧拉)梁模型模拟了多壁碳纳米管弯曲特性,其分析总结了多壁碳纳米管层间相互作用对弯曲特性的影响规律^[6].然而,在纳米尺度环境中,碳纳米管受到

* 收稿日期: 2014-11-24; 修订日期: 2015-03-31

基金项目: 国家自然科学基金(11261026;11462010)

作者简介: 尹春松(1989—),男,河南信阳人,硕士生(E-mail: 1147926281@qq.com);

杨洋(1981—),男,昆明人,副教授,博士(通讯作者. E-mail: yangyang0416@kmust.edu.cn).

很多小尺度长程效应的影响,其弯曲特性和宏观梁、壳结构的弯曲性能相比有很大区别,这使得经典连续介质力学模型的计算精度受到影响。为了解决该模型的不足之处,很多经典力学引伸模型得到广泛应用,例如应变梯度模型^[7]、应力耦合模型^[8]和非局部应力场模型^[9-11]。

非局部连续介质弹性理论是 Eringen 于 20 世纪 60 年代提出的^[12],其主旨观点认为弹性体内部受到小尺度效应的影响,各点的应力不仅仅与该点的应变有关,而且和该点附近某个区域内所有点的应变相关。该区域称为非局部领域,即长程效应的影响范围。非局部理论在研究材料裂纹尖端应力分布方面取得了巨大成功。而对于尺度更小的碳纳米管,非局部理论同样成为了重要的研究手段。自 2003 年 Peddieson 将非局部理论应用于分析单壁碳纳米管的弯曲特性至今^[9],已有超过 700 篇相关报道。然而大部分非局部模型都是将非局部力学量(剪力、弯矩)直接代入经典连续介质力学平衡方程,忽略了小尺度效应对力学平衡关系的影响,从而产生了很多计算误差。例如当非局部悬臂梁在自由端受集中力作用时,梁的弯曲特性和经典模型一样,完全不受小尺度效应的影响,这一结论显然不准确^[9-11]。除此之外,几乎所有非局部模型研究显示,碳纳米管刚度受到小尺度效应的影响而降低,这一结论同样和其它理论模型或者实验结果相悖^[4]。因此目前大部分非局部纳米梁模型或者壳模型只能被称为非完整模型(PN)。

Lim 等考虑到上述问题,应用非局部本构关系式,根据 Hamilton 变分原理,严格推导出纳米梁模型的平衡方程和边界条件,建立了考虑小尺度效应的纳米非局部力学平衡关系,得到了解析非局部模型(AN)^[13-15]。该模型在研究碳纳米管屈曲和振动特性时,得到了和其它理论模型或者实验相一致的结果^[13-15]。本文将基于 AN 模型的合理性,建立非局部 AN-Timoshenko 梁模型(ANT),推导相应的平衡方程和边界条件,并用来分析碳纳米管的弯曲特性,研究讨论 Timoshenko 梁的剪切效应和非局部小尺度效应对碳纳米管弯曲特性的综合影响规律。

1 ANT 模型建立

本文将碳纳米管视为弹性梁,置于直角坐标系中,如图 1 所示。

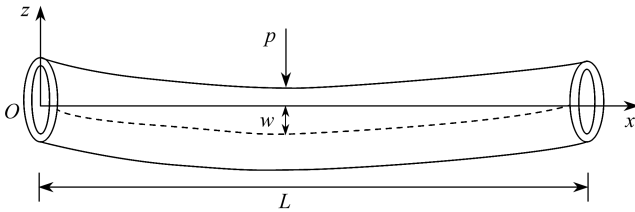


图 1 受横向载荷的碳纳米管弯曲示意图

Fig. 1 A carbon nanotube in the Cartesian coordinate system under transverse load

图 1 中, w , p 和 L 分别为挠度、载荷与管长。如前所述,非局部理论的应力受到非局部领域内所有点应变的共同影响^[12],其本构关系式如下:

$$\sigma(x) - (e_0 a)^2 \frac{\partial^2 \sigma(x)}{\partial x^2} = E \varepsilon(x), \quad (1)$$

其中, E 为弹性模量, $\sigma(x)$ 和 $\varepsilon(x)$ 分别为应力与应变, $e_0 a$ 为非局部尺度参数,表征非局部效应强弱,当 $e_0 a = 0$ 时,式(1)退化为经典宏观本构关系。由式(1)可得非局部弯矩 $M_{xx}(x)$ 和剪力 $Q_{xz}(x)$, 分别为

$$M_{xx}(x) = \int_A \sigma(x) z dA, \quad (2)$$

$$Q_{xz}(x) = \int_A G\gamma_{xz} dA = AG\kappa \left(\frac{\partial w}{\partial x} - \varphi \right), \quad (3)$$

其中, φ 表示横截面 A 的转角, κ 为剪切修正系数, G 为剪切模量且

$$\int_A G dA = AG\kappa,$$

切应变 $\gamma_{xz} = \partial w / \partial x - \varphi$. 式(2)和式(3)的无量纲表达式为

$$\bar{M}_{xx} = - \sum_{n=1}^{\infty} \tau^{2(n-1)} \varphi^{(2n-1)}, \quad (4)$$

$$\bar{Q}_{xz} = \frac{AGL^2\kappa}{EI} \left(\frac{\partial \bar{w}}{\partial \bar{x}} - \varphi \right), \quad (5)$$

其中, $\bar{x} = x/L$, $\bar{w} = w/L$, $\tau = e_0 a/L$, $\langle n \rangle$ 表示对 \bar{x} 的 n 阶导数. 由式(4)和式(5)可得 PN-Timoshenko 梁模型的平衡方程为

$$\bar{Q}_{xz} - \bar{M}_{xx}^{(1)} = 0, \quad (6)$$

$$\frac{EI}{L} \frac{\partial \bar{Q}_{xz}}{\partial \bar{x}} + L^2 p(x) = 0. \quad (7)$$

式(6)和(7)是将式(4)和(5)直接代入经典 Timoshenko 梁的平衡方程而得. 该 PN 模型忽略了小尺度效应对力学平衡关系的影响, 会出现如前所述的误差. 建立 ANT 模型, 需要根据 Hamilton 原理, 推导系统的能量变分平衡关系, 从而得到 ANT 平衡方程和边界条件. 按照这一思想, 图 1 所示的非局部碳纳米管的应变能为

$$u = u_1 + u_2 + u_3 + u_s, \quad (8)$$

式(8)中

$$u_1 = \frac{1}{2} E \varepsilon_x^2, \quad (9a)$$

$$u_2 = \frac{1}{2} E \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} \tau^{2n} (\varepsilon_x^{(n)})^2, \quad (9b)$$

$$u_3 = E \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \tau^{2(n+1)} \sum_{m=1}^n [(-1)^{m+1} \varepsilon_x^{(m)} \varepsilon_x^{(2(n+1)-m)}] \right\}, \quad (9c)$$

$$u_s = \frac{1}{2} G \gamma_{xz}^2. \quad (9d)$$

碳纳米管的总应变能为

$$U = \int_V u dV, \quad (10)$$

其中, V 为图 1 所示整个管壁的体积. 外部荷载 p 所做功为

$$W = \int_0^L p w dx = L^2 \int_0^1 p \bar{w} d\bar{x}. \quad (11)$$

由此可得系统的 Lagrange 能量函数为

$$\ell = U - W. \quad (12)$$

根据 Hamilton 原理, $\delta \ell = \delta(U - W)$. 将式(9)~(11)代入式(12)后, 经过变分推导, 可得

$$\delta \ell = \int_0^1 \left\{ \frac{EI}{L} \left[\bar{Q} - \bar{M}^{(1)} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \tau^{2n} \bar{M}^{(2n+1)} \right] \delta \varphi - \right.$$

$$\begin{aligned}
& \left[AGL\kappa \left(\frac{\partial^2 \bar{w}}{\partial \bar{x}^2} - \frac{\partial \varphi}{\partial \bar{x}} \right) + L^2 p(x) \right] \delta \bar{w} \Big\} d\bar{x} + \\
& \frac{EI}{L} \left[\left(-\bar{M} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \tau^{2n} \bar{M}^{(2n)} \right) \delta \varphi - \left(\tau^2 \bar{M}^{(1)} + 2 \sum_{n=2}^{\infty} \tau^{2n} \bar{M}^{(2n-1)} \right) \delta \varphi^{(1)} - \right. \\
& \left. \left(2 \sum_{n=1}^{\infty} \tau^{2(n+1)} \bar{M}^{(2n)} \right) \delta \varphi^{(2)} + \left(\tau^4 \bar{M}^{(1)} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \tau^{2(n+2)} \bar{M}^{(2n+1)} \right) \delta \varphi^{(3)} - \right. \\
& \left. \left(\tau^4 \varphi^{(1)} - 2 \sum_{n=1}^{\infty} \tau^{2(n+2)} \bar{M}^{(2n)} \right) \delta \varphi^{(4)} + \right. \\
& \left. \left(\tau^4 \varphi - \tau^6 \bar{M}^{(1)} - 2 \sum_{n=1}^{\infty} \tau^{2(n+3)} \bar{M}^{(2n+1)} \right) \delta \varphi^{(5)} \dots \right]_0^1 + \\
& \frac{EI}{L} [\bar{Q} \delta \bar{w}]_0^1 = 0. \tag{13}
\end{aligned}$$

式(13)中 $\delta \varphi$ 和 $\delta \bar{w}$ 取值任意, 因为要满足方程等于 0, 需有

$$\bar{Q}_{xz} - \bar{M}_{ef}^{(1)} = 0, \tag{14}$$

$$a \frac{\partial \bar{Q}_{xz}}{\partial \bar{x}} + L^2 p(x) = 0, \tag{15}$$

其中

$$\bar{M}_{ef} = \bar{M}_{xx} - 2 \sum_{n=1}^{\infty} \tau^{2n} \bar{M}_{xx}^{(2n)} = \sum_{n=1}^{\infty} (2n-3) \tau^{2(n-1)} \varphi^{(2n-1)} \tag{16}$$

为等效非局部弯矩。式(15)中 $a = AGL\kappa$ 。式(14)和(15)为 ANT 模型的平衡方程, 其力学平衡关系已由 \bar{M}_{ef} 代替式(6)中的 \bar{M}_{xx} , 式(6)和式(7)的经典模型平衡关系已不适用^[13-15], 而式(13)中其余各高阶项组成了 ANT 模型的边界条件, 经典模型的边界条件同样不再适用。

2 基于 ANT 模型的碳纳米管弯曲特性

在分析过程中, 首先确定碳纳米管各项参数: $E = 5.5 \text{ TPa}$, $G = 2.3 \text{ TPa}$, $\kappa = 0.8$, $L = 10 \text{ nm}$, 壁厚 $h = 0.34 \text{ nm}$, 碳管截面积 $A = 3.0 \times 10^{-19} \text{ m}^2$, 其截面抗弯模量 $I = 1.78 \times 10^{-38} \text{ m}^4$ 。根据式(13)~(16), 考虑相应边界条件, 可求解得到碳纳米管在不同载荷与边界约束条件下的挠曲线表达式。为验证计算结果的合理性, 本文以分子动力学(MD)方法计算相同载荷与约束条件下的碳纳米管弯曲挠度。该结果模拟对象为非周期性(5,5)碳纳米管, 力场为 compass force, 温度为 $25 \text{ }^\circ\text{C}$, 模拟结果经无量纲化后与 ANT 和 PNT 模型计算结果对比, 以检验非局部模型模拟结果的准确性。

2.1 两端简支受均布载荷 $p(x) = P_0$

当碳纳米管受均布载荷 $p(x) = P_0$ 且两端简支时, 由式(13)~(16)可解得挠曲线函数表达式:

$$\begin{aligned}
\bar{w} = 4L^2 P_0 \sum_{k=1}^{\infty} & \left[\frac{1}{a \sum_{n=0}^{\infty} (2n-3) (-1)^{n+1} \tau^{2(n-1)} [(2k-1)\pi]^{2(n+2)}} + \right. \\
& \left. \frac{1}{b [(2k-1)\pi]^3} \right] \bar{x} \sin[(2k-1)\pi], \tag{17}
\end{aligned}$$

式中 $b = AGL^2 \kappa / EI$ 。由式(17)所得挠度曲线如图 2 所示。

为便于比较分析,将式(6)和式(7)的PNT模型挠曲线列于图2中,和MD结果对比分析.由图可见,无量纲非局部参数 $\tau = 0$ 时的挠曲线与经典Timoshenko梁挠曲线相重叠,说明此时ANT,PNT模型无差别.而当 τ 值逐渐增大,非局部小尺度效应增强时,ANT模型模拟的碳纳米管无量纲挠度 \bar{w} 随着非局部尺度参数 τ 增加而减小,证明非局部效应越强,碳纳米管刚度越大.如图2所示,MD模拟结果同样低于 $\tau = 0$ 时的挠曲线,证明分子动力学模拟碳纳米管的微观非局部尺度效应对刚度影响趋势和ANT模型一致,即验证了ANT模型的合理性,而PNT模型则显示了完全相反的结果.进一步分析发现,图2中MD模拟结果和 $\tau = 0.1$ 的ANT挠曲线最为接近,说明该 τ 值为两端简支碳纳米管受均布载荷时的合理取值.

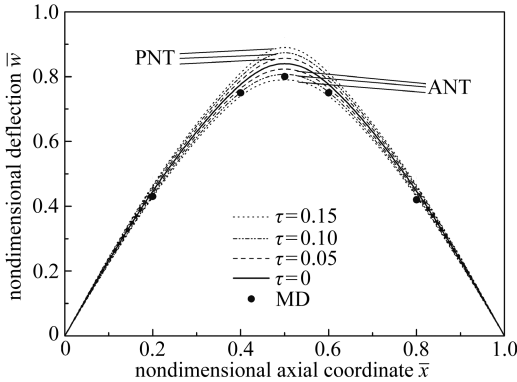


图2 两端简支碳纳米管,受均布载荷 $p(x) = P_0$ 时的挠曲线

Fig. 2 Deflection of the simply supported CNT under uniformly distributed load

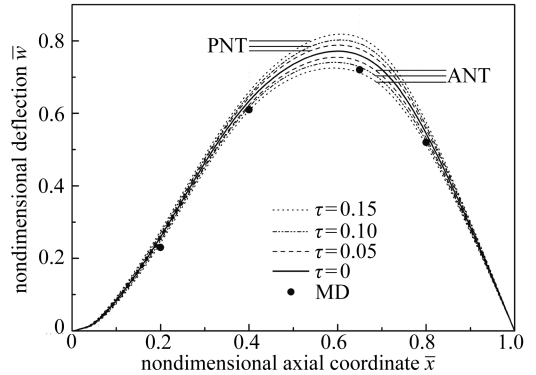


图3 一端简支一端固定碳纳米管,受均布载荷 $p(x) = P_0$ 时的挠曲线

Fig. 3 Deflection of the simply supported-clamped CNT under uniformly distributed load

2.2 一端简支一端固定,受均布载荷 $p(x) = P_0$

当碳纳米管依然受均布载荷 $p(x) = P_0$,边界条件变为一端简支一端固定时,由式(14)~(16)及式(6)和(7)可解得相应的ANT、PNT挠曲线函数表达式.该式过于复杂,在此只将挠曲线函数图形以及相应的MD模拟结果列于图3中.

图3所示两种模型的挠曲线随 τ 值变化规律仍然相反,而ANT结论同样和MD模拟结论一致,且当 $\tau = 0.05$ 时,和MD结果最为接近,该值即为ANT模型模拟简支-固定碳纳米管的合理取值.图3所示结论再一次验证了非局部尺度效应具有提高碳纳米管刚度的作用.由于边界约束条件为非对称情况,图3中最大挠度未出现在碳纳米管的中点位置.根据计算结果,ANT模型、PNT模型和经典模型($\tau = 0$)的最大挠度均位于 $\bar{x} = 0.65$ 处.

2.3 悬臂梁型碳纳米管,自由端受集中力

当悬臂梁型碳纳米管自由端受到集中力时,由式(14)~(16)和相应边界条件,可得挠曲线函数:

$$\bar{w} = \left(\frac{1}{\tau} C_1 - \tau C_2 \right) e^{-\bar{x}/\tau} + \frac{1}{3} C_3 \bar{x}^3 + \frac{1}{2} C_4 \bar{x}^2 + C_5 \bar{x} + C_6, \quad (18)$$

其中, $C_1 \sim C_6$ 为积分常数,表达式较为复杂,本文仅在图4中列出挠度曲线.

由式(6)和(7)所得PNT模型挠曲线为

$$\bar{w} = \frac{p_0 L^3}{6EI} \bar{x}^2 (3 - \bar{x}). \quad (19)$$

式(19)为经典模型的挠曲线方程,无论 τ 取何值,式(19)都不受影响,和ANT模型中 $\tau \rightarrow$

0 时的结果一致,即图 4 中的实线。而从图 4 中可见,ANT 模型模拟了碳纳米管挠曲线随 τ 值变化的情况,和之前的算例以及 MD 模拟结果一致,随着 τ 值增加,碳纳米管刚度增加,弯曲挠度逐渐减小。图 4 中 MD 模拟结果和 $\tau = 0.1$ 的 ANT 挠曲线最为接近,说明该 τ 值为悬臂梁型碳纳米管自由端受集中力时的合理取值,而 PNT 模型同样无法计算出该结论。因此,通过和 MD 模拟结果对比,ANT 模型的合理性被进一步证实。

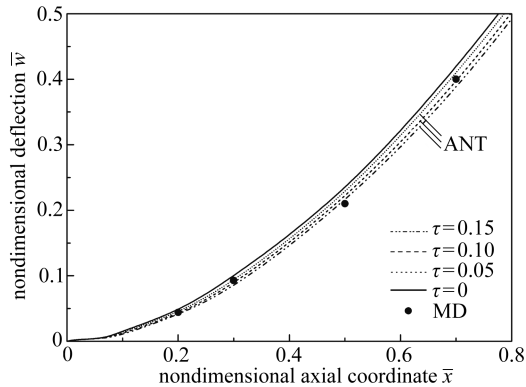


图 4 悬臂梁型碳纳米管,自由端受集中力时的挠曲线

Fig. 4 Deflection of the cantilever CNT under a point load at the free end

3 结 论

本文从非局部弹性理论本构关系式出发,考虑到本构关系的非线性特点,通过变分原理,推导出具有剪切变形的 ANT 弯曲平衡方程和相应的边界条件。发现在平衡方程和边界条件中,由非局部应力产生的弯矩 \bar{M}_{xx} 已不满足经典 Timoshenko 梁平衡关系,必须将 \bar{M}_{xx} 替换为等效弯矩 \bar{M}_{ef} , 方能满足经典平衡关系。在该模型基础上,本文对受到不同边界约束条件和外载荷的碳纳米管弯曲特性进行了详细的分析与讨论。所有计算结果均表明,基于 ANT 模型的碳纳米管相比没有非局部效应的碳纳米管(基于经典 Timoshenko 梁模型的碳纳米管),在同等边界条件和外载作用下,弯曲挠度减小,刚度增加。当 ANT 悬臂梁模型受到自由端集中力作用时,其挠度随非局部效应增加而减小,而此前的 PNT 非局部模型,对该算例的计算结果均未显示任何非局部影响,结果和经典模型完全相同。通过和分子动力学模拟结果对比,ANT 模型的合理性和可靠性得到验证。

参考文献(References):

- [1] Iijima S. Helical microtubules of graphitic carbon[J]. *Nature*, 1991, **354**(7): 56-58.
- [2] Tomanek D, Enbody R J. *Science and Application of Nanotubes*[M]. US: Springer, 2000: 1-274.
- [3] Ajayan P M. Applications of carbon nanotubes[J]. *Topics in Applied Physics*, 2001, **80**: 391-425.
- [4] Lam D C C, Yang F, Chong A C M, Wang J, Tong P. Experiments and theory in strain gradient elasticity[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2003, **51**(8): 1477-1508.
- [5] Wang Q, Liew K M, He X Q, Xiang Y. Local buckling of carbon nanotubes under bending[J]. *Applied Physics Letter*, 2007, **91**(9): 093128.
- [6] Ru C Q. Effective bending stiffness of carbon nanotubes[J]. *Physical Review B*, 2000, **62**: 9973-9976.

- [7] Aifantis E C. Gradient deformation models at nano micro and macro scales[J]. *Journal of Engineering Material Technology*, 1999, **121**(2): 189-202.
- [8] Ma H M, 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**(1): 3379-3391.
- [9] Peddieson J, Buchanan G R, McNitt R P. Application of nonlocal continuum models to nanotechnology[J]. *International Journal of Engineering Science*, 2003, **41**(3/5): 305-312.
- [10] Reddy J N. Nonlocal theories for bending, buckling and vibration of beams[J]. *International Journal of Engineering Science*, 2007, **45**(2/8): 288-307.
- [11] Wang Q, Liew K M. Application of nonlocal continuum mechanics to static analysis of micro- and nano-structures[J]. *Physical Letter A*, 2007, **363**(3): 236-242.
- [12] Eringen A C. *Nonlocal Continuum Field Theories*[M]. US: Springer, 2002: 71-87.
- [13] 林 C W. 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[J]. *应用数学和力学*, 2010, **31**(1): 35-50. (Lim C W. On the truth of nanoscale for nanobeams based on nonlocal elastic stress field theory: equilibrium, governing equation and static deflection[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2010, **31**(1): 35-50. (in Chinese))
- [14] YANG Yang, Lim C W. A variation principle approach for buckling of carbon nanotubes based on nonlocal Timoshenko beam models[J]. *Nanotechnology*, 2011, **6**(4): 363-377.
- [15] Lim C W. Equilibrium and static deflection for bending of a nonlocal nanobeam[J]. *Advances in Vibration Engineering*, 2009, **8**(4): 277-300.

Shear Deformable Bending of Carbon Nanotubes Based on a New Analytical Nonlocal Timoshenko Beam Model

YIN Chun-song, YANG Yang

(Department of Engineering Mechanics, Kunming University of Science and Technology,
Kunming 650051, P.R.China)

Abstract: According to Hamilton's principle, a new mathematical model was established and the analytical solutions to the nonlocal Timoshenko beam model (ANT) were obtained based on the nonlocal elastic continuum theory in view of shear deformation and nonlocal effects. The new ANT equilibrium equations and boundary conditions were derived for bending analysis on carbon nanotubes (CNTs) of simply supported, clamped and cantilever types. The ANT deflection solutions demonstrate that the CNT stiffness is enhanced by the presence of nonlocal stress effects, as is predicted by the widely accepted but complicated molecular dynamics model and proved by tests. Furthermore, the new ANT model indicates verifiable bending behaviors of a cantilever CNT with point load at the free end, which depends on the magnitude of nonlocal stress. Therefore, this new model conveniently gives better prediction about the mechanical performances of nanostructures.

Key words: Hamilton's principle; nonlocal stress; carbon nanotube; Timoshenko beam; bending behavior

Foundation item: The National Natural Science Foundation of China(11261026;11462010)