

基于微极性弹性力学的碳纳米管中 波的传播特性^{*}

谢根全^{1)†} 夏平²⁾

1) 湖南科技大学土木工程学院, 湘潭 411201)

2) 湖南工程学院机械工程系, 湘潭 411205)

(2006 年 11 月 10 日收到, 2007 年 7 月 3 日收到修改稿)

基于微极性弹性理论推导出的碳纳米管的应力-应变关系, 使用哈密顿原理建立了碳纳米管的动力学微分方程. 通过求动力学微分方程的波动解, 获得碳纳米管中波的频率与波数的关系即弥散关系, 另外还得到了波的群速度和特征波面. 对所得结果进行了讨论.

关键词: 微极性弹性力学, 碳纳米管, 群速度, 特征波面

PACC: 4620, 4630, 0340K

1. 引 言

碳纳米管具有圆柱形的空心壳结构, 每一层碳纳米管的基本单元是正六边形单元, 每个六边形的角上有一个碳原子. 碳纳米管具有良好的力学、物理和化学性能, 它可以作为理想的高性能纳米合成物的强化材料^[1-7]. 为了挖掘碳纳米管的巨大应用潜力, 对碳纳米管的力学行为进行充分研究是很有必要的. 至今, 人们对碳纳米管的力学性能已经进行了大量的研究^[8-12].

由于用实验方法来获得碳纳米管的力学性能很困难, 目前主要是从理论上考察碳纳米管的力学性能, 主要方法有分子动力学法、量子力学法和连续介质模型^[13-15]. 因为在模拟大尺寸的原子系统时, 应用原子模拟需要耗费大量的计算机时, 计算成本高, 在实际应用中受到很大限制. 因此, 需要探索一种能够不受模拟时间和尺寸限制的连续介质力学模型. 到目前为止, 已提出了许多研究碳纳米管力学性质的连续介质力学模型^[16-18]. 文献 [19-21] 中分别提出了微极性弹性理论, 微极性弹性理论与经典弹性理论的主要区别在于引入了一个附加变量, 即微观转动场, 这个场是与平动位移相互独立的, 基本

方程中包含 6 个独立参数. 可以通过分子动力学计算碳纳米管的自由振动频率, 然后根据微极性弹性理论计算相同碳纳米管的自由振动频率, 利用遗传算法反求这 6 个参数. 非局部弹性理论和微极性理论都是非经典弹性理论, 只是微极性理论是从几何的角度来建立基本方程的, 而非局部弹性理论是从物性的角度来考虑的. 目前在国际上应用非经典连续介质力学研究碳纳米管的力学性能是一个热点. 本文基于微极性弹性理论研究碳纳米管的波动特性, 主要研究它们的弥散特性、群速度、特征波面.

2. 基本方程

作者在文献 [22] 中从几何的角度推导出基于微极性弹性力学的应力-应变关系, 对于“扶手椅型”、“锯齿型”碳纳米管, 其本构关系如下:

$$\begin{pmatrix} \tau_{11} \\ \tau_{22} \\ \tau_{12} \\ \tau_{21} \\ \bar{m}_{13}/l \\ \bar{m}_{23}/l \end{pmatrix} = \frac{\sqrt{3}E_s}{6\eta^3}$$

^{*} 国家自然科学基金(批准号:10372031)资助的课题.

[†] E-mail: xiaoyuanyixiong@163.com

$$\begin{aligned} & \times \begin{bmatrix} \frac{(\eta^2 + 3)\eta^2}{\eta^2 + 1} & \frac{(\eta^2 - 1)\eta^2}{\eta^2 + 1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{(\eta^2 - 1)\eta^2}{\eta^2 + 1} & \frac{(\eta^2 + 3)\eta^2}{\eta^2 + 1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{3\eta^2 + 1}{\eta^2 + 1} & \frac{\eta^2 - 1}{\eta^2 + 1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\eta^2 - 1}{\eta^2 + 1} & \frac{3\eta^2 + 1}{\eta^2 + 1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/6 \end{bmatrix} \\ & \times \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \hat{\gamma}_{12} \\ \hat{\gamma}_{21} \\ \hat{\phi}_{13} l \\ \hat{\phi}_{23} l \end{pmatrix} = \mathbf{D}\boldsymbol{\varepsilon}, \end{aligned} \quad (1)$$

式中 $\tau_{ij} (i, j = 1, 2)$ 为应力张量, \bar{m}_{i3} 是应力偶张量, l 为 C—C 键长, $\eta = l/h$ (h 为碳纳米管壁厚), E_s 为碳纳米管的弹性模量, ε 是线应变, $\hat{\gamma}$ 是剪应变, $\hat{\phi}_{i3}$ 是微观转角梯度。

在柱坐标系中 $r, x_2 = r\beta$, 基于微极性弹性力学的碳纳米管的几何方程^[22]可以写成如下矩阵形式：

$$\begin{aligned} & \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \hat{\gamma}_{12} \\ \hat{\gamma}_{21} \\ \hat{\phi}_{13} l \\ \hat{\phi}_{23} l \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \beta} & -\frac{1}{r} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial x_1} & 0 & -1 \\ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \beta} & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & l \frac{\partial}{\partial x_1} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{l}{r} \frac{\partial}{\partial x_1} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \phi \end{pmatrix} \\ & = \mathbf{L}\mathbf{u}, \end{aligned} \quad (2)$$

式中 \mathbf{L} 可以写为

碳纳米管内任意一点的位移向量可近似表达为

$$\mathbf{u} = \mathbf{N}(r)\mathbf{V}, \quad (6)$$

式中

$$\mathbf{N}(r) = [(1 - 3\hat{r} + 2\hat{r}^2)\mathbf{I} \quad 4(\hat{r} - \hat{r}^2)\mathbf{I} \quad (-\hat{r} + 2\hat{r}^2)\mathbf{I}], \quad (7)$$

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + \mathbf{L}_2 \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \beta} + \mathbf{L}_3 \frac{1}{r} + \mathbf{L}_4. \quad (3)$$

这里 $\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2, \mathbf{L}_3$ 和 \mathbf{L}_4 是如下常数矩阵：

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_1 &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & l \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \\ \mathbf{L}_2 &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & l \end{bmatrix}, \\ \mathbf{L}_3 &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \\ \mathbf{L}_4 &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (4)$$

3. 物理量分析

有了上述基本方程, 可应用哈密顿原理获得系统动力学方程. 首先应用插值函数来表示碳纳米管壳体的径向位移, 然后应用复指数函数来表示碳纳米管的轴向和周向位移. 将壳体壁沿径向划分为内、中、外 3 个圆环形节面, 分别用下标 i, m, o 表示, 每个节面有 3 个平移自由度 (u_1, u_2, u_3) 和 1 个微观转动自由度 ϕ . 单元节点的位移向量假设为

$$\mathbf{V} = [u_{1i} \quad u_{2i} \quad u_{3i} \quad \phi_i \quad u_{1m} \quad u_{2m} \quad u_{3m} \quad \phi_m \quad u_{1o} \quad u_{2o} \quad u_{3o} \quad \phi_o]^T. \quad (5)$$

其中 $\hat{r} = (r - r_o)/h$, \mathbf{I} 是 4×4 的单位矩阵.

碳纳米管的应变能

$$U = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_{r_o}^{r_o+h} \boldsymbol{\varepsilon}^T \boldsymbol{\sigma} r dr d\beta dx_1$$

$$+ \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_{r_0}^{r_0+h} \bar{m}^T \boldsymbol{\varphi} r dr d\beta dx_1, \quad (8)$$

式中

$$\bar{m} = \begin{bmatrix} \bar{m}_{13}/l \\ \bar{m}_{23}/l \end{bmatrix},$$

$$\boldsymbol{\varphi} = \begin{bmatrix} \hat{\phi}_{13} l \\ \hat{\phi}_{23} l \end{bmatrix}.$$

将方程(2)代入方程(8)得

$$U = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_{r_0}^{r_0+h} \left(\frac{\partial \mathbf{u}^T}{\partial x_1} \mathbf{C}_{11} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_1} + \frac{1}{r} \frac{\partial \mathbf{u}^T}{\partial x_1} \mathbf{C}_{12} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \beta} \right. \\ + \frac{1}{r} \frac{\partial \mathbf{u}^T}{\partial x_1} \mathbf{C}_{13} \mathbf{u} + \frac{\partial \mathbf{u}^T}{\partial x_1} \mathbf{C}_{14} \mathbf{u} + \frac{1}{r} \frac{\partial \mathbf{u}^T}{\partial \beta} \mathbf{C}_{12}^T \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_1} \\ + \frac{1}{r^2} \frac{\partial \mathbf{u}^T}{\partial \beta} \mathbf{C}_{22} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \beta} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial \mathbf{u}^T}{\partial \beta} \mathbf{C}_{23} \mathbf{u} \\ + \frac{1}{r} \frac{\partial \mathbf{u}^T}{\partial \beta} \mathbf{C}_{24} \mathbf{u} + \frac{1}{r} \mathbf{u}^T \mathbf{C}_{13}^T \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_1} + \frac{1}{r^2} \mathbf{u}^T \mathbf{C}_{23}^T \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \beta} \\ + \frac{1}{r^2} \mathbf{u}^T \mathbf{C}_{33} \mathbf{u} + \frac{1}{r} \mathbf{u}^T \mathbf{C}_{34} \mathbf{u} + \mathbf{u}^T \mathbf{C}_{14}^T \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_1} \\ \left. + \mathbf{u}^T \mathbf{C}_{24}^T \frac{1}{r} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \beta} + \frac{1}{r} \mathbf{u}^T \mathbf{C}_{34}^T \mathbf{u} + \mathbf{u}^T \mathbf{C}_{44}^T \mathbf{u} \right) r dr d\beta dx_1, \quad (9)$$

式中

$$C_{ij} = \mathbf{L}_i^T \mathbf{D} \mathbf{L}_j \quad (i, j = 1, 2, 3, 4).$$

用位移向量表示碳纳米管的动能为

$$T = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_{r_0}^{r_0+h} \frac{\partial \mathbf{u}^T}{\partial t} \mathbf{m} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} r dr d\beta dx_1, \quad (10)$$

式中

$$\mathbf{m} = \begin{bmatrix} \rho & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \rho & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \rho J \end{bmatrix}, \quad (11)$$

其中 ρ 为材料密度, ρJ 为微转动惯量.

为了获得碳纳米管的动力学微分方程,应用如下哈密顿方程:

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} (T - U) dt = 0. \quad (12)$$

结合方程(2)–(12)得

$$-A_1 \frac{\partial^2 \mathbf{V}}{\partial x_1^2} - A_2 \frac{\partial^2 \mathbf{V}}{\partial \beta \partial x_1} - A_3 \frac{\partial^2 \mathbf{V}}{\partial \beta^2} \\ + A_4 \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial x_1} + A_5 \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial \beta} + A_6 \mathbf{V} + \mathbf{M} \frac{\partial^2 \mathbf{V}}{\partial t^2} \\ = 0, \quad (13)$$

式中

$$A_1 = \int_{r_0}^{r_0+h} N^T \mathbf{C}_{11} N r dr, \quad (14)$$

$$A_2 = \int_{r_0}^{r_0+h} N^T (\mathbf{C}_{12} + \mathbf{C}_{21}) N dr, \quad (15)$$

$$A_3 = \int_{r_0}^{r_0+h} \frac{1}{r} N^T \mathbf{C}_{22} N dr, \quad (16)$$

$$A_4 = \int_{r_0}^{r_0+h} N^T \left[\frac{1}{r} (\mathbf{C}_{13}^T - \mathbf{C}_{13}) + \mathbf{C}_{14}^T - \mathbf{C}_{14} \right] N r dr, \quad (17)$$

$$A_5 = \int_{r_0}^{r_0+h} N^T \left[\frac{1}{r} (\mathbf{C}_{23}^T - \mathbf{C}_{23}) + \mathbf{C}_{24}^T - \mathbf{C}_{24} \right] N dr, \quad (18)$$

$$A_6 = \int_{r_0}^{r_0+h} N^T \left[\frac{1}{r^2} \mathbf{C}_{33} + \frac{1}{r} (\mathbf{C}_{34} + \mathbf{C}_{34}^T) + \mathbf{C}_{44}^T \right] N r dr, \quad (19)$$

$$\mathbf{M} = \int_{r_0}^{r_0+h} N^T \mathbf{m} N r dr. \quad (20)$$

3.1. 弥散关系

假设方程(13)中的位移矢量为如下的复指数形式:

$$\mathbf{V}(\beta, x_1, t) = \mathbf{U} e^{(n\beta + k_{x_1} x_1 - \omega t)}, \quad (21)$$

式中 ω 为角频率, n 为周向波数, k_{x_1} 为轴向波数, \mathbf{U} 为节点位移幅值. 当与轴向成 φ 角的螺旋波沿半径为 R_0 的碳纳米管壳体传播时,有

$$n = R_0 k \sin \varphi, \quad (22)$$

$$k_{x_1} = k \cos \varphi.$$

将方程(21)代入方程(13)得

$$[\mathbf{K} - \omega^2 \mathbf{M}] \mathbf{U} = 0, \quad (23)$$

式中

$$\mathbf{K} = A_1 k_{x_1}^2 + A_2 n k_{x_1} + A_3 n^2 + j A_4 k_{x_1} + j A_5 n + A_6. \quad (24)$$

要使方程(23)有非零解,必须有

$$|\mathbf{K} - \omega^2 \mathbf{M}| = 0. \quad (25)$$

每取一个波数 k , 由方程(25)可以获得 16 个碳纳米管的自然频率 ω_m ($m = 1, 2, 3, \dots, 16$). 波数 k 与频率 ω_m 的关系称为弥散关系.

3.2. 相速度和群速度

第 m 阶模态的相速度 c_{pm} 定义为

$$c_{pm} = \omega_m / k. \quad (26)$$

第 m 阶模态的群速度定义为

$$c_{gm} = \frac{d\omega_m}{dk}. \quad (27)$$

利用方程(23)–(27)式可以写成

$$c_{gm} = \frac{\psi_m^L K'_k \psi_m^R}{2\omega_m \psi_m^L M \psi_m^R}, \quad (28)$$

这里 K' 表示刚度矩阵 K 的导数, ψ_m^L, ψ_m^R 分别为特征值方程 (23) 的左、右特征向量.

3.3. 波的特征面

由方程 (26) 可以得到

$$f_{cm}(c_{pm}, \omega_m) = \psi_m^L K \psi_m^R - c_{pm}^2 \psi_m^L M \psi_m^R = 0. \quad (29)$$

由方程 (29) 确定的面称为第 m 阶模态的相速面 (phase velocity surface), 表示平面波的相速度与波传播方向的关系.

将 $s_{pm} = 1/c_{pm}$ 代入 (29) 式得

$$f_{sm}(c_{pm}, \omega_m) = s_{pm}^2 \psi_m^L K \psi_m^R - \psi_m^L M \psi_m^R = 0. \quad (30)$$

由方程 (30) 确定的面称为第 m 阶模态的相慢面 (phase slowness surface), 表示平面波到达的时间与波传播方向的关系.

在极坐标 $(|r_m|, \beta_p)$ 中, 由平面波相前直线包络成的面称为相波面 (phase wave surface). 相波面可以由下式确定:

$$\begin{aligned} |r_m| &= c_{pm} \sqrt{1 + \alpha_s^2} \\ \beta_p &= \arctan \alpha_s + \varphi, \end{aligned} \quad (31)$$

式中

$$\alpha_s = \frac{\psi_m^L K'_\varphi \psi_m^R}{2\psi_m^L K \psi_m^R}. \quad (32)$$

由方程 (28) 可以得到

$$f_{gm}(c_{gm}, \omega_m) = \psi_m^L K \psi_m^R - 2\omega_m c_{gm} \psi_m^L M \psi_m^R = 0. \quad (33)$$

由方程 (33) 确定的面称为第 m 阶模态的群速面 (group velocity surface), 表示平面波的能量传播速度与波传播方向的关系.

将 $s_{gm} = 1/c_{gm}$ 代入方程 (32) 得

$$f_{gm}(s_{gm}, \omega_m) = s_{gm} \psi_m^L K \psi_m^R - 2\omega_m \psi_m^L M \psi_m^R = 0. \quad (34)$$

在极坐标 $(|R_m|, \beta_g)$ 中, 由平面波群前直线包络成的面称为群波面 (group slowness surface). 群波面可以由下式确定:

$$\begin{aligned} |R_m| &= c_{gm} \sqrt{1 + \alpha_q^2}, \\ \beta_g &= \arctan \alpha_q + \varphi, \end{aligned} \quad (35)$$

式中

$$\alpha_q = \frac{\psi_m^L K'_{k\varphi} \psi_m^R - \psi_m^L K'_\varphi \psi_m^R c_{gm} / \omega_m}{2\psi_m^L K'_k \psi_m^R}. \quad (36)$$

4. 算 例

在算例中, 碳纳米管的厚度^[23] $h = 0.066 \text{ nm}$,

C—C 键长^[24] $l = 0.142 \text{ nm}$, 弹性模量^[25] $E_s = 1 \text{ TPa}$, 密度^[18] $\rho = 1.3 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$, 内径 $R_i = 2 \text{ nm}$.

计算中采用以下归一化参量:

$$\begin{aligned} \bar{k} &= k(R_o - R_i), \\ \bar{\lambda} &= \lambda(R_o - R_i), \\ \bar{R} &= R(R_o - R_i), \\ \bar{\omega} &= \omega(R_o - R_i)\sqrt{\rho/D_{11}}, \\ \bar{c}_{gm} &= \frac{d\omega_m}{dk}. \end{aligned}$$

图 1—图 4 分别表示与碳纳米管轴向成 $0^\circ, 30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$ 方向传播的螺旋波的弥散曲线. 图 1 为与碳纳米管轴向成 0° 即沿碳纳米管轴向传播的波的弥散曲线. 从图 1 可以看出, 波的第 3 阶和第 4 阶模态的弥散曲线中分别有部分直线段的延长线通过坐标原点, 弥散曲线通过原点的直线段的波是非弥散的, 其物理意义是波的相速度(波速)为常数, 这时相速

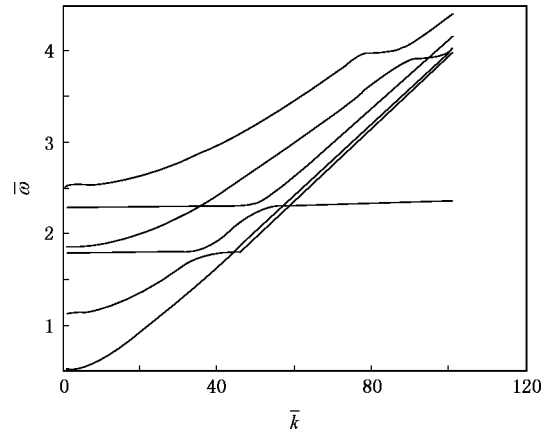


图 1 $\varphi = 0^\circ$ 的螺旋波前 6 阶模态的弥散曲线

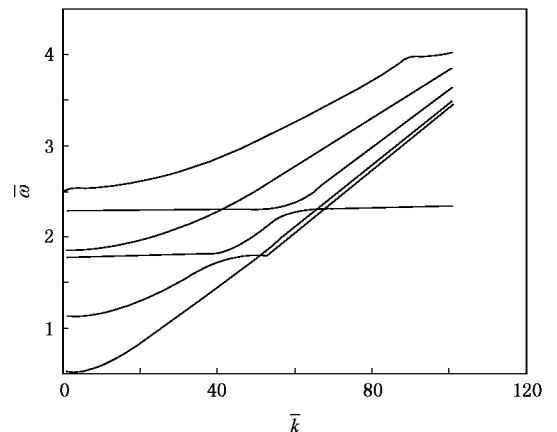


图 2 $\varphi = 30^\circ$ 的螺旋波前 6 阶模态的弥散曲线

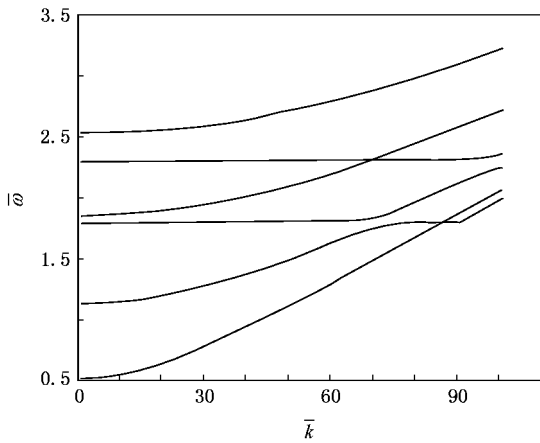


图 3 $\varphi = 60^\circ$ 的螺旋波前 6 阶模态的弥散曲线

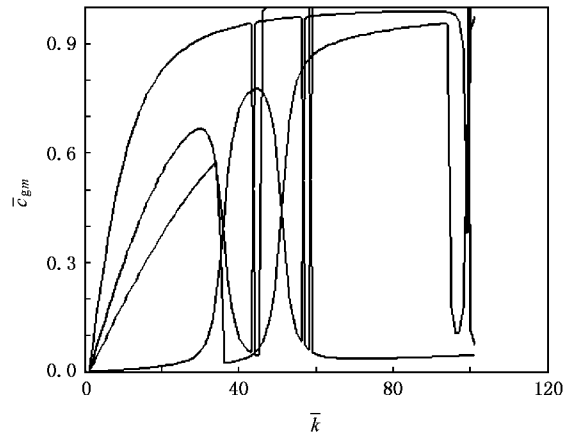


图 6 $\varphi = 30^\circ$ 的螺旋波前 4 阶模态的群速度曲线

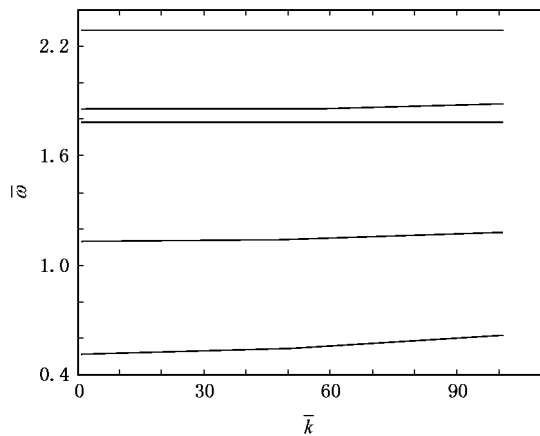


图 4 $\varphi = 90^\circ$ 的螺旋波前 6 阶模态的弥散曲线

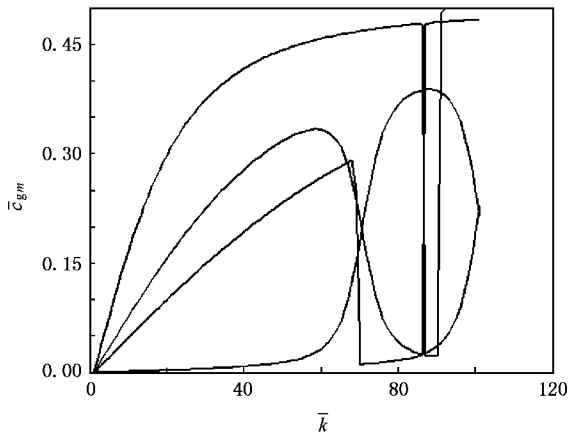


图 7 $\varphi = 60^\circ$ 的螺旋波前 4 阶模态的群速度曲线

度等于群速度. 其他模态的波都是弥散的, 说明这些频率的波在碳纳米管中传播的速度是变化的. 图 2 为与碳纳米管轴向成 30° 传播的螺旋波的弥散曲线. 从图 2 可以看出, 波的第 3 阶和第 4 阶模态的弥

散曲线也分别有部分直线段的延长线通过坐标原点, 这种情况和图 1 类似, 只是图 2 的非弥散直线段比图 1 的非弥散直线段长. 图 3 是螺旋角为 60° 的螺旋波的前 6 阶模态的弥散曲线. 从图 3 可以看出, 与碳纳米管轴向成 60° 传播的螺旋波是弥散的.

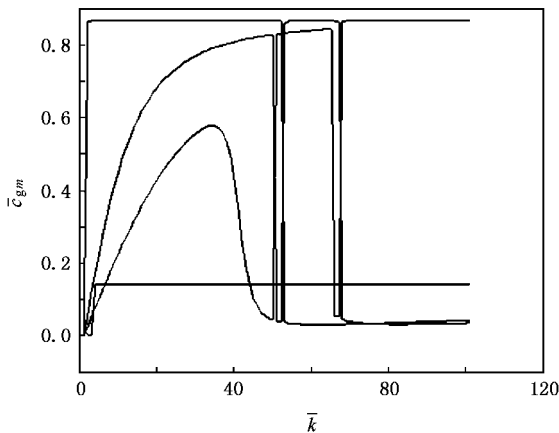


图 5 $\varphi = 0^\circ$ 的螺旋波前 4 阶模态的群速度曲线

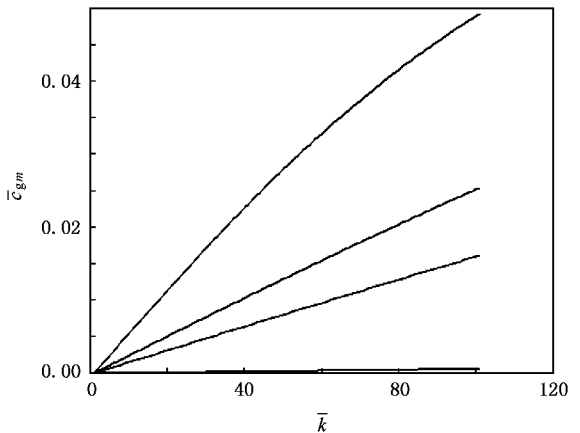


图 8 $\varphi = 90^\circ$ 的螺旋波前 4 阶模态的群速度曲线

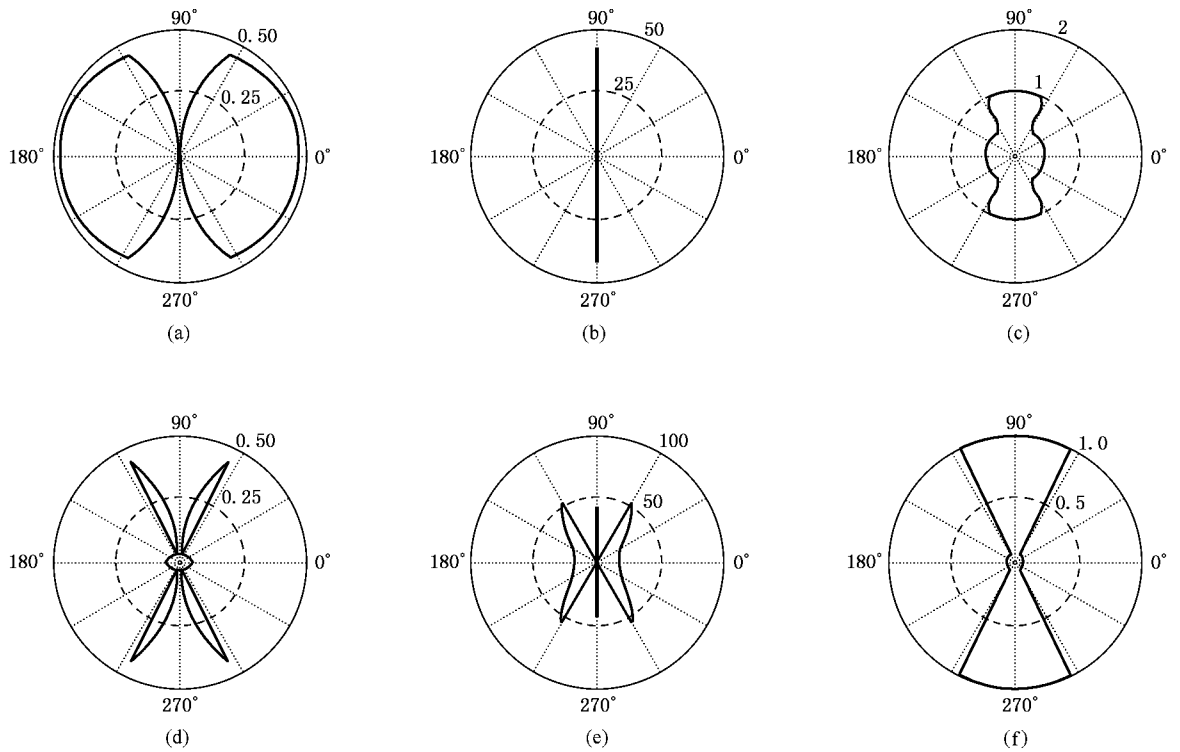


图9 碳纳米管的第1阶模态的特征波面 (a)相速面,(b)相慢面,(c)相波面,(d)群速面,(e)群慢面,(f)群波面

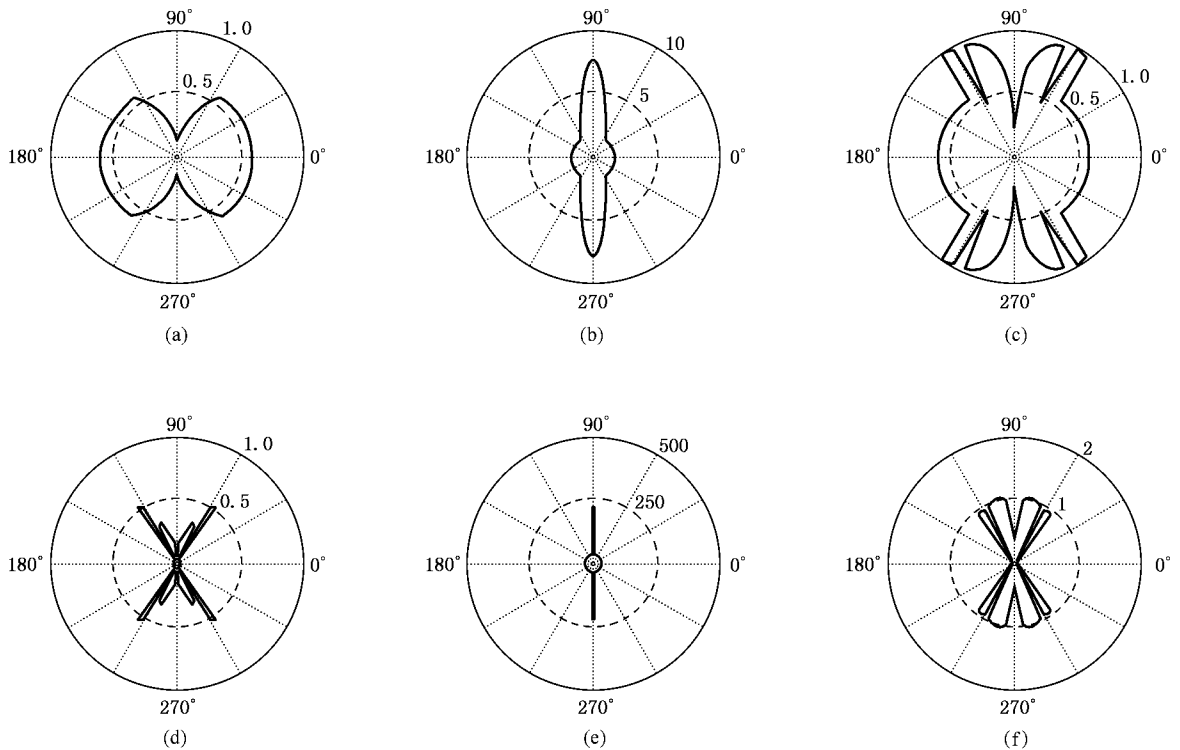


图10 碳纳米管的第2阶模态的特征波面 (a)相速面,(b)相慢面,(c)相波面,(d)群速面,(e)群慢面,(f)群波面

图4是螺旋角为90°的螺旋波的前6阶模态的弥散曲线。从图4可以看出,与碳纳米管轴向成90°传播

的螺旋波也是弥散的。综合图1—图4可以发现,随着螺旋角φ的增大,在碳纳米管中传播的波的速度

变化也随之增大.

图 5—图 8 所示为与碳纳米管轴向分别成 0° , 30° , 60° , 90° 方向传播的波的前 4 阶模态的群速度曲线. 从图 5 可以看出, 沿碳纳米管轴向传播的波的第 3 阶和第 4 阶模态的群速度曲线中有部分是水平直线段, 水平直线段与图 1 中延长线通过坐标原点的直线段是相对应的. 群速度在小的波数范围内存在负值, 这表明能量传播方向与相位传播方向相反. 图 6 所示为与碳纳米管轴向成 30° 传播的螺旋波的群速度曲线. 从图 6 可以看出, 第 3 阶和第 4 阶模态的群速度曲线中有部分是水平直线段, 水平直线段与图 2 中延长线通过坐标原点的直线段是相对应的. 图 6 中的群速度曲线的水平直线段比图 5 的水平直线段长.

图 7 所示为与碳纳米管轴向成 60° 传播的螺旋波的群速度曲线. 从图 7 可以看出, 这些群速度曲线没有水平直线段, 表明群速度不是恒定的, 随波数而变化. 图 8 所示为与碳纳米管轴向成 90° 传播的螺旋波的前 4 阶模态的群速度曲线. 与图 5—图 7 不同, 图 8 中的群速度曲线不存在突变, 而群速度曲线发生突变是由于模态发生改变引起的.

碳纳米管第 1 阶模态和第 2 阶模态的 6 个特征波面分别如图 9 和图 10 所示. 从图 9 和图 10 可以看出, 第 1 阶和第 2 阶模态的 6 个特征波面中的曲线都不是圆形, 说明沿不同方向传播的波, 它的传播速度、到达某一点所需时间等物理量不同, 也就是它的波动物理量随方向而改变.

5. 结 论

基于微极性弹性理论, 应用哈密顿原理获得碳纳米管的波动微分方程, 对特征值方程求解后得到了碳纳米管中波的弥散曲线和群速度曲线以及 6 个特征波面. 研究表明: 当波沿着与碳纳米管轴向成 0° 和 30° 方向传播时, 波的第 3 和第 4 阶模态的弥散曲线的部分线段是通过原点的直线, 是非弥散的, 其他模态的波在碳纳米管中传播都是弥散的. 第 1 阶和第 2 阶模态的 6 个特征波面中的曲线都不是圆形. 这说明沿不同方向传播的波, 它们的传播速度、到达某一点所需时间等物理量相差很大, 也说明碳纳米管具有很强的各向异性.

- [1] Ebbesen T W 1994 *Annu. Rev. Mater. Sci.* **24** 235
- [2] Dresselhaus M S, Dresselhaus G, Eklund P C 1996 *Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes* (San Diego : Academic) p5
- [3] Maiti A 2000 *Chem. Phys. Lett.* **331** 21
- [4] Cohen M L 2001 *Mater. Sci. Eng.* **15** 1
- [5] Qian D, Wagner G J, Liu W K, Yu M F, Ruoff R S 2002 *Appl. Mech. Rev.* **55** 495
- [6] Vaia R A, Tolle T B, Schmitt G F, Imeson D, Jones R J 2001 *SAMPE J.* **37** 24
- [7] Maruyama B, Alam K 2002 *SAMPE J.* **38** 59
- [8] Wang L F, Hu H Y 2005 *Phys. Rev. B* **71** 195412
- [9] Xie G Q, Han X, Long S Y, Tian J H 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 4192 (in Chinese) [谢根全、韩 旭、龙述尧、田建辉 2005 物理学报 **54** 4192]
- [10] Wang Q, Varadan V K 2006 *Int. J. Sol. Struct.* **43** 254
- [11] Wang Y, Wang X X, Ni X G, Wu H A 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 3120 (in Chinese) [王 宇、王秀喜、倪向贵、吴恒安 2003 物理学报 **52** 3120]
- [12] Wang Q 2006 *Int. J. Struc. Stab. Dyn.* **6** 285
- [13] Bao W X, Zhu C C 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 3552 [保文星、朱长纯 2006 物理学报 **55** 3552]
- [14] Duan W H, Wang C M, Zhang Y Y 2007 *J. Appl. Phys.* **101** 24305
- [15] Wang L, Zhang H W, Wang J B 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 1506 (in Chinese) [王 磊、张洪武、王晋宝 2007 物理学报 **56** 1056]
- [16] Lourie O, Cox P M, Wagner H D 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 1638
- [17] Govindjee S, Sackman J L 1999 *Sol. State Commun.* **110** 227
- [18] Yoon J, Ru C Q, Mioduchowski A 2004 *Composites B* **35** 87
- [19] Eringen A C 1972 *Science* **10** 1
- [20] Nowacki W 1970 *Theory of Micropolar Elasticity* (Berlin : Springer-Verlag) p35
- [21] Lakes R S, Yang J F C 1983 *Develop. Mech.* **12** 239
- [22] Xie G Q, Long S Y 2006 *Comp. Mater. Cont.* **4** 11
- [23] Yakobson B I, Brabec C J, Bernhol C J 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 2511
- [24] Hernandez E, Goze C, Bernier P, Rubio A 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 4502
- [25] Lu J 1997 *Phys. Rev. Lett.* **79** 1297

Characteristics of wave propagating through carbon nanotubes investigated on the basis of micropolar elasticity^{*}

Xie Gen-Quan^{1)†} Xia Ping²⁾

1 *College of Civil Engineering, Hunan University of Science and Technology, Xiangtan 411201, China*

2 *Department of Mechanical Engineering, Hunan Institute of Engineering, Xiangtan 411205, China*

(Received 10 November 2006 ; revised manuscript received 3 July 2007)

Abstract

Relationship of stress and strain for a carbon nanotube was obtained on the basis of micropolar elasticity. The principle of Hamilton was utilized to derive the dynamic differential equation. Dispersion relationship (the relationship between frequency and wavenumber) of wave propagating through a carbon nanotube was obtained from the dynamic differential equation. In addition , group velocities and characteristic wave surfaces were also investigated. The obtained results are discussed.

Keywords : micropolar elastic mechanics , carbon nanotube , group velocity , characteristic wave surface

PACC : 4620 , 4630 , 0340K

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10372031).

[†] E-mail : xiaoyuanyixiong@163.com