

单壁碳纳米管非线性力学行为的数值模拟^{*}

姚小虎 韩 强[†] 辛 浩

(华南理工大学交通学院工程力学系, 广州 510640)

(2007 年 5 月 10 日收到 2007 年 6 月 5 日收到修改稿)

单壁碳纳米管的力学行为是纳米复合材料和纳米器械的基本问题之一. 使用有限元方法系统地研究了单壁碳纳米管的轴压和纯弯变形, 并将有限元模拟结果和分子动力学模拟结果进行了比较. 研究表明单壁碳纳米管的轴压屈曲载荷受直径变化的影响; 单壁碳纳米管在弯曲载荷作用下的屈曲和后屈曲行为强烈地依赖于管长和管径的变化, 合理地选择碳纳米管的弹性模量和壁厚, 有限元方法能够很好地解释碳纳米管的屈曲机理. 研究大尺度的纳米力学问题时, 有限元方法将会成为更加准确、快捷的数值模拟方法.

关键词: 单壁碳纳米管, 非线性力学行为, 有限元

PACC: 4620, 4630L, 6148

1. 引 言

碳纳米管具有许多优异的力学、电学和化学性能, 具有很高的强度和韧性, 可以预见, 将碳纳米管作为复合材料的增强体可以表现出良好的强度、弹性、抗疲劳性和各向异性. 因此, 碳纳米管基础力学行为的研究近年来受到了人们的广泛关注^[1-3].

单壁碳纳米管在轴向压缩和弯曲载荷作用下的力学行为是碳纳米管在纳米机械中应用的基础, 碳纳米管的许多物理性质如导电性, 强烈地受到屈曲变形的影响^[4]. 由于受到纳米尺度的限制, 碳纳米管屈曲行为的实验研究显得非常困难. 因此理论分析方法广泛应用于研究碳纳米管的屈曲变形. 目前主要有两种方法可以解释碳纳米管的力学行为: 分子动力学方法和连续介质力学方法. 分子动力学模拟方法在揭示碳纳米管的力学行为方面起了重要的作用^[2, 5-12], 包括经典分子动力学方法 (MD)^[5]、紧束分子动力学 (tight-binding MD)^[13] 和密度泛函分子动力学 (density function MD)^[14], 但是由于分子动力学计算规模较大, 对计算尺寸有严格限制, 因此直接从纳观和微观结构来预测宏观材料的性能和结构的响应带来很大困难. Yakobson 等^[5]利用分子动力学方法研究了单壁碳纳米管轴压作用下的屈曲问题, 并将得到的结果与连续壳模型进行了对比, 他们发现

连续壳模型能够预测分子动力学模拟所得的所有屈曲模态. Ru^[15]研究了弹性介质中双壁碳纳米管的轴压屈曲问题. 采用相似的理论, Han 等^[16, 17]研究了双壁碳纳米管的扭转屈曲和弯曲不稳定性. Yao 等^[18]研究了双壁碳纳米管的轴压后屈曲行为, He 等^[19]将层间相互作用视为层间距离和管径的函数, 考虑任意两层而不仅是近邻两层间的相互作用, 研究了多壁碳纳米管的屈曲. Xie 等^[20]基于非局部弹性理论, 在考虑小尺度效应的情况下, 研究了单壁碳纳米管在轴向压力作用下的屈曲.

连续介质力学是一门相对完善的学科, 利用纳米结构与宏观结构的某些相似性, 采用连续介质力学理论进行唯象模拟, 是一种非常有效的分析手段. 基于连续介质力学基本理论的连续体模型已经成为连接原子运动和连续介质力学性质如弹性模量、屈服和断裂强度的理想模型. 本文基于连续介质力学的有限元方法系统地研究了单壁碳纳米管的轴压和纯弯屈曲变形, 并将有限元模拟结果和分子动力学模拟结果进行了比较. 研究表明单壁碳纳米管的轴压屈曲载荷受直径变化的影响; 单壁碳纳米管在弯曲载荷作用下的屈曲和后屈曲行为强烈地依赖于管长和管径的变化. 研究结果同时表明合理地选择碳纳米管的弹性模量和壁厚, 有限元方法能够很好地解释碳纳米管的屈曲机理. 对于大尺度的纳米力学问题, 有限元方法将会成为更加准确和快捷的

^{*} 国家自然科学基金 (批准号: 10672059) 和广东省自然科学基金 (批准号: 106025689) 资助的课题.

[†] E-mail: emqhan@scut.edu.cn

数值模拟方法.

2. 模拟方法

2.1. 连续壳体理论的应用

碳纳米管可以视为是由具有六边形晶格结构的石墨层卷曲而成的完善圆柱壳,能否将弹性壳体理论应用于碳纳米管问题的研究,必须通过分子动力学模拟和实验研究来验证.

需要特别指出的是,碳纳米管弹性模量等弹性常数是连续介质框架下的力学概念,由于碳纳米管只是一层卷曲的石墨烯,其壁厚具有虚拟的性质,厚度 t 必须采用连续介质假设后才具有意义.目前人们对碳纳米管弹性模量在实验和理论分析中数值的不一致性尚未能达成共识.

碳纳米管的弯曲和屈曲行为主要依赖于石墨板的弯曲特性,石墨板的弯曲特性应用石墨的原子特性来描述.

板的弯曲刚度为

$$D = \frac{Et^3}{12(1-\nu^2)} \text{ 或 } D = EI. \quad (1)$$

面内刚度为

$$C = Et, \quad (2)$$

其中 E , ν , I , t 分别是弹性模量、泊松比、惯性矩以及石墨板的厚度. Ru^[21]指出研究碳纳米管的弯曲特性时,如果弯曲刚度选用方程(1)来描述,那么等效壁厚应该取很小,而不应直观地取 0.34 nm. Yakobson 等^[5]也指出分子动力学模拟得到的弯曲刚度小于用方程(1)得到的弯曲刚度,如果假定碳纳米管的弹性模量为 5.5TPa 的话,碳纳米管的有效厚度应取为 0.066 nm,换言之,如果将碳纳米管的有效厚度取为 0.066 nm,方程(1)仍然成立,如果碳纳米管的有效厚度采用其他的定义方式,则方程(1)不再成立,即碳纳米管壁厚的定义应与其弹性模量相联系.此时,需要将弯曲刚度视为一独立的材料常数,同理碳纳米管的面内刚度 Et 也应视为一个独立的材料常数.表 1 给出了碳纳米管力学行为研究中,人们常采用的一些计算参数.

Yakobson^[5]由分子动力学得到弯曲刚度 $D = 0.85 \text{ eV}$, 面内刚度 $C = 360 \text{ J/m}^2$, 本文的有限元模拟中按照 Yakobson^[5]建议的参数取弹性模量 $E = 5.5 \text{ TPa}$, 壁厚 $t = 0.066 \text{ nm}$.

表 1 碳纳米管的弹性模量、壁厚和弯曲刚度

研究者	方法	弯曲刚度($\text{eVnm}^2/\text{atom}$)	弹性模量/TPa	壁厚/nm
Yakobson 等 ^[5]	MD	0.02235	5.5	0.066
Zhou 等 ^[22]	TBMD	0.02922	5.1	0.074
Tu 等 ^[23]	LDA	0.03055	4.7	0.075
Kundin 等 ^[24]	ab initio	0.03843	3.859	0.089
Pantano 等 ^[25]	FEM	0.02886	4.84	0.075

将连续介质力学的壳体理论直接应用于碳纳米管力学问题的研究经常受到小变形假设的限制,但是实验和分子动力学模拟发现碳纳米管在各种载荷作用下都经历了非线性大变形阶段,显然,小变形线性弹性分析方法无法预测碳纳米管的大变形行为,这意味着我们必须采用计及几何非线性效应的连续弹性壳体理论来模拟单壁碳纳米管的大变形行为.目前大多数商业软件的壳单元都具有可以描述小应变、大转动的功能.ABAQUS 有限元软件是模拟结构非线性效应最好的商业软件之一,因此本文采用 ABAQUS 有限元软件来模拟碳纳米管的非线性力学行为.在有限元计算时,将碳纳米管离散为四节点双曲率壳单元 S4 和 S4R,它们可以有效地模拟横向剪切变形的影响,同时能够很好地解释有限膜应变,允许在厚度方向尺寸发生变化,适合大变形非线性分析.S4 是全积分单元,S4R 是沙漏控制的缩减积分单元.当壳体的厚度增加时,采用剪切弯曲理论(shear flexible Mindlin shell theory)来描述结构的非线性力学行为;当壳体的厚度较小时,一般的壳单元采用柯西霍夫薄壳理论来描述,随着壁厚的减小,横向剪切变形几乎可以忽略.

2.2. 初始内应力状态的影响

由于碳纳米管是由石墨板卷曲而成, Yakobson^[5]指出,在分析碳纳米管的力学性能时必须考虑由曲率引起的初始内应力,所以连续体模型应该将初始内应力考虑进去.石墨板的卷曲能可以表达为

$$U_R = \frac{D}{2R^2} = \frac{1}{2} D\kappa^2 = \frac{Et^3}{24(1-\nu^2)} \kappa^2. \quad (3)$$

碳纳米管环向的初始内应力为

$$\sigma_\theta = -\frac{Et^3}{12(1-\nu^2)} \frac{1}{R^3}. \quad (4)$$

上述两式中, R 为碳纳米管的半径, $\kappa = 1/R$ 是初始曲率, E 和 t 分别是碳纳米管的弹性模量和壁厚.本文利用 ABAQUS/Standard 软件中的 SIGINI 子程序将初始内应力施加于碳纳米管壁,从而描述由

于石墨板卷曲引起的初始内应力.由(4)式可以看出,随着碳纳米管直径的增加,初始内应力迅速减小,因此对较大直径的多壁碳纳米管完全可以忽略初始内应力的影响.

3. 有限元结果与分子动力学结果的对比

由于碳纳米管尺寸太小,难以用常规实验手段进行测试,特别地,碳纳米管位置的控制、拾取、放置、特殊情况下夹具的制造、加载的实现、力的测量及纳米尺度力学变形的表征是实验研究中遇到的最大困难.因此,目前碳纳米管力学性能的实验方法大都是间接测量方法,而且大量的实验工作主要集中在研究碳纳米管的弹性性质方面,其中最主要的是碳纳米管的弹性模量^[3, 26, 27].由于受到纳米尺度和纳米力学变形表征的限制,碳纳米管屈曲行为的实验研究是非常困难的.目前关于碳纳米管屈曲的实验结果尚未见报道,因此理论和数值模拟方法被广泛用来研究碳纳米管的屈曲行为.随着更精确的力场和完善的数值计算方法的提出,分子动力学模拟方法在揭示碳纳米管的力学行为方面起了重要的作用^[2, 5].Solares 等^[28]指出分子动力学模拟方法是研究材料性质的一个强有力的工具.但是分子动力学受到计算尺寸的限制,直接从纳观和微观结构来预测宏观材料的性能和结构的响应带来很大困难.因此,有限元方法将成为更加快捷、准确的分析方法.为了验证有限元模拟结果的可靠性,我们将有限元计算结果和经典的分子动力学结果进行了对比,下面给出详细的计算结果.

3.1. 轴向载荷作用下单壁碳纳米管的变形

首先建立弹性薄壳有限元模型,长度 $L = 6 \text{ nm}$, 直径 $d = 0.95 \text{ nm}$, 弹性模量 $E = 5.5 \text{ TPa}$, 壁厚 $t = 0.066 \text{ nm}$, 泊松比 $\nu = 0.19$.和分子动力学方法类似,通过控制位移来实现轴向加载.图 1 给出了单壁碳纳米管轴向压缩变形的有限元模拟结果.在加载过程中随着应变的不断增大出现了四个不同的屈曲构型,分别对应压缩应变为 $0.051, 0.080, 0.1058$ 和 0.145 ,如图 1 所示.

Yakobson^[5]采用 Tersoff-Brenner 多体势研究了(7,7)碳纳米管在轴向压缩下的变形过程.碳纳米管长度 $L = 6 \text{ nm}$,直径 $d = 0.95 \text{ nm}$.施加的载荷是端部均匀的位移载荷.图 2 给出了 Yakobson 分子动力学的计算结果,在加载过程中随着应变的不断增大同

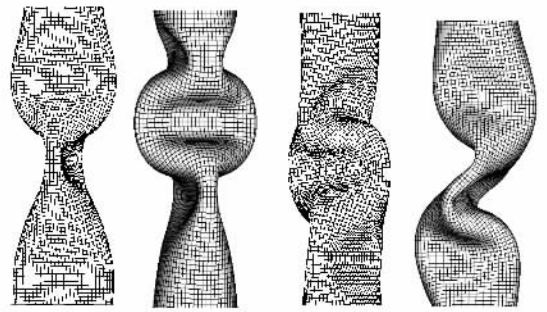


图 1 单壁碳纳米管轴向压缩变形有限元模拟结果

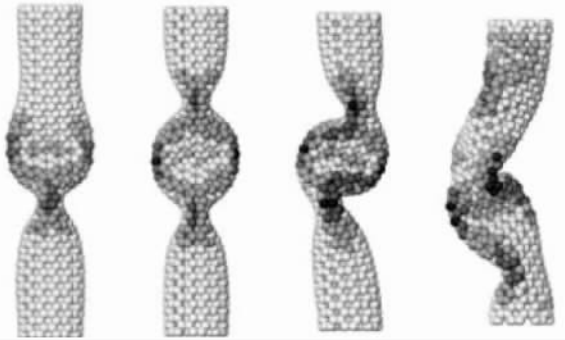


图 2 分子动力学计算结果^[5]

样出现了四个不同的屈曲构型,分别对应压缩应变为 $0.05, 0.076, 0.09$ 和 0.13 ,如图 2 所示.将 Yakobson 得到的分子动力学模拟结果(如图 2 所示)和本文有限元的计算结果(图 1)进行对比,可以发现屈曲的临界值以及后屈曲的构型都符合得非常好.这表明只要选择正确的方法,完全可以用连续壳体理论来预测碳纳米管的屈曲临界值和后屈曲构型.

Ni 等^[29]利用分子动力学方法模拟了 $L = 10 \text{ nm}$ 的(10,10)单壁碳纳米管的轴向压缩变形过程,碳纳米管的一个端部采用固支边界条件,另一端施加轴

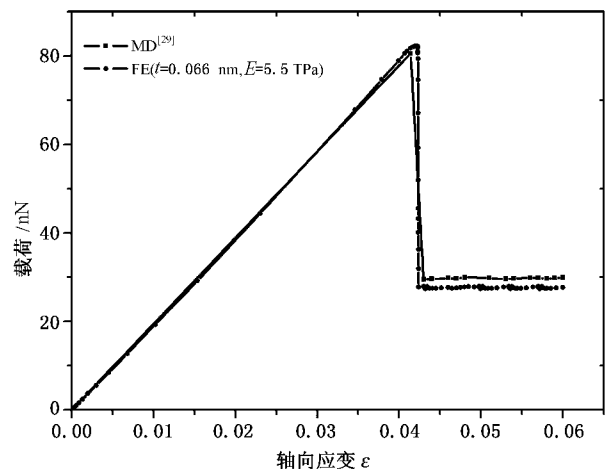


图 3 轴向压缩载荷随应变的变化曲线

向位移载荷. 本文有限元模拟中采用同样的方法来模拟轴向压缩过程. 图 3 给出了本文有限元计算结果和 Ni 等^[29]分子动力学计算结果的对比, 可以看出, 无论是临界载荷、临界屈曲应变还是后屈曲路径都符合得非常好, 这进一步验证了本文采用的有限元模拟方法的有效性.

3.2 弯曲载荷作用下单壁碳纳米管的变形

本文建立的有限元模型为长度 $L = 8 \text{ nm}$, 直径

$d = 1.019 \text{ nm}$ 的弹性薄壳. 其弹性模量和壁厚分别为 $E = 5.5 \text{ TPa}$, $t = 0.066 \text{ nm}$, 泊松比 $\nu = 0.19$. 在碳纳米管的两个端面施加刚性面以保证端面形状不发生改变, 同时又能保证变形后的轴线与端面保持垂直. 弯曲变形由位移载荷控制, 边界条件和分子动力学模拟的边界条件相同. 本文有限元计算得到了碳纳米管弯曲应变能和弯矩随弯曲角度的变化关系以及碳纳米管的弯曲构型, 如图 4 所示.

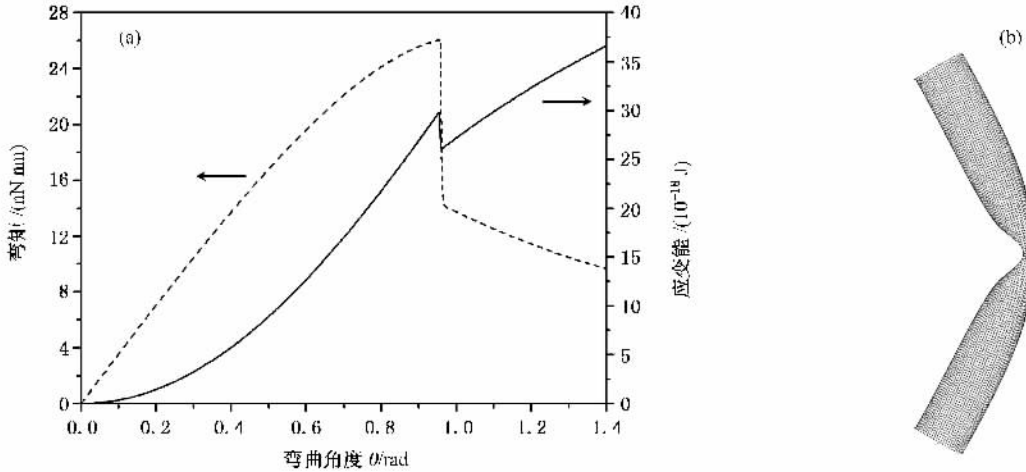


图 4 单壁碳纳米管弯曲变形有限元计算结果 (a)应变能、弯矩随弯曲角度的关系 (b)弯曲构型图

Yakobson 等^[5]采用分子动力学方法计算了单壁碳纳米管在弯曲载荷作用下的非线性力学行为. 计算模型为(13 0)的碳纳米管, 长度 $L = 8 \text{ nm}$, 直径 $d = 1.019 \text{ nm}$. 两端的原子固定在刚性面上, 施加位移载荷实现碳纳米管的弯曲变形. 图 5 给出了 Yakobson 等分子动力学模拟的计算结果.

时碳纳米管结构发生弹性屈曲, 然后能量基本上以线性形式增加. 从分子动力学和有限元的计算结果都可以看出当弯曲角度 $\theta = 1 \text{ rad}$ 时碳纳米管发生临界屈曲, 二者符合得非常好. 图 4(b)和图 5(b)所示的碳纳米管的弯曲构型可以看出, 有限元结果和分子动力学结果有着很好的一致性. 这更有理由使我们相信, 有限元方法完全可以模拟纳米尺度的非线性力学问题.

由图 4(a)和图 5(a)中可以看到, 应变能随弯曲角度的平方形式增长, 当达到临界值时突然降低, 此

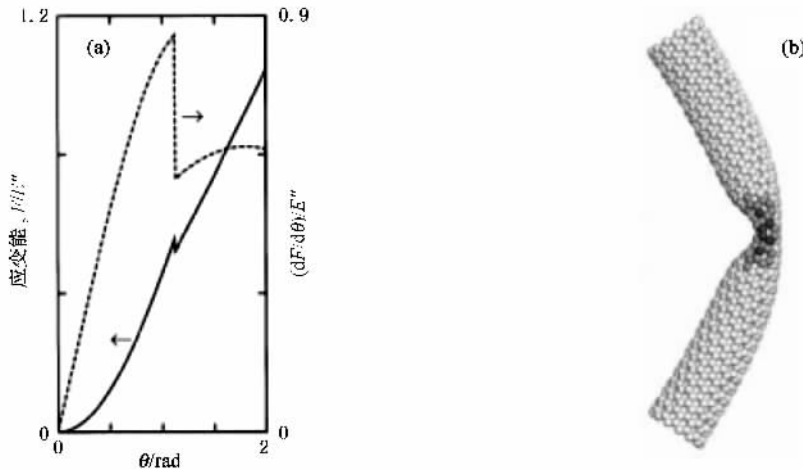


图 5 分子动力学计算结果^[5] (a)应变能、弯矩随弯曲角度的关系;(b)弯曲构型图

4. 计算结果

4.1. 单壁碳纳米管的轴压屈曲

在有限元计算中,通过调整网格的密度来控制计算结果的收敛性,即认为屈曲的临界值与网格的变化没有关系时,网格的密度不再细化.上节已经给出了四个不同压缩应变下单壁碳纳米管的不同屈曲构型,可以看出分子动力学的模拟结果与有限元的分析结果符合较好,关于屈曲构型的计算在此不再重复.

本文对固定长径比 $L/d = 7.7$ 的不同直径的锯齿形(Zigzag)单壁碳纳米管的临界屈曲载荷 P_{cr} 进行了研究,有限元计算中弹性模量和壁厚分别取 $E = 5.5 \text{ TPa}$, $t = 0.066 \text{ nm}$,泊松比 $\nu = 0.19$.表 2 给出了本文有限元计算结果和 Liew 等^[30]分子动力学计算结果的对比.

从表 2 可以看出,有限元计算得到的临界屈曲载荷和分子动力学的计算结果符合较好.计算结果表明随着直径 d 的增大,临界屈曲载荷也增大.当直径 $d = 1.176 \text{ nm}$ 时,临界屈曲载荷 P_{cr} 达到最大值 $1.32 \times 10^{-7} \text{ N}$;当直径 d 超过 1.176 nm 时,临界屈曲载荷 P_{cr} 开始下降,最后稳定在 $1.145 \times 10^{-7} \text{ N}$.这里值得注意的是对于任意固定长径比 L/d 的单壁碳纳米管,总存在一个最优直径.

表 2 锯齿型单壁碳纳米管的屈曲载荷

(n, m)	直径 $d/10^{-1} \text{ nm}$	临界屈曲载荷 $P_{cr}/10^{-7} \text{ N}$	
		Liew 等 ^[30] 分子动力学 计算结果	本文有限元 计算结果
(4, 0)	3.13	0.72	0.751
(5, 0)	3.92	0.94	0.966
(10, 0)	7.84	1.19	1.215
(15, 0)	11.76	1.30	1.32
(20, 0)	15.67	1.25	1.28
(25, 0)	19.59	1.16	1.183
(30, 0)	23.51	1.12	1.16
(35, 0)	27.43	1.11	1.155
(40, 0)	31.35	1.10	1.15
(45, 0)	35.27	1.10	1.148
(50, 0)	39.18	1.09	1.145
(55, 0)	43.10	1.09	1.145

齿形单壁碳纳米管的临界轴向屈曲载荷 P_{cr} 随直径 d 的变化曲线.从有限元和分子动力学的计算结果都可以看出,随着直径 d 的增大,临界屈曲载荷迅速增大.但是当直径 d 达到最优值 1.176 nm 时,随着直径 d 的增加,临界屈曲载荷 P_{cr} 缓慢减小,最后趋于一个稳定的值.

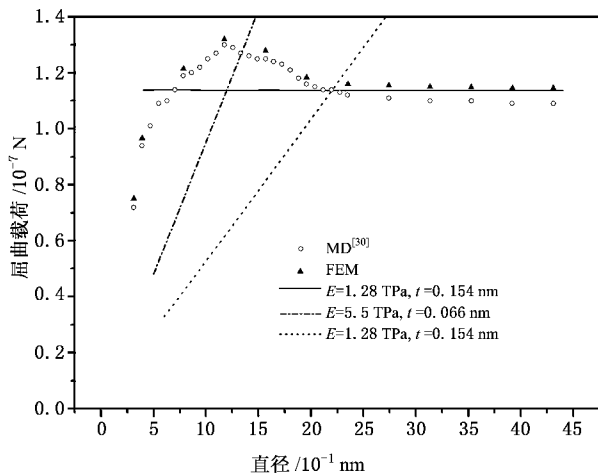


图 6 临界屈曲载荷随直径的变化关系

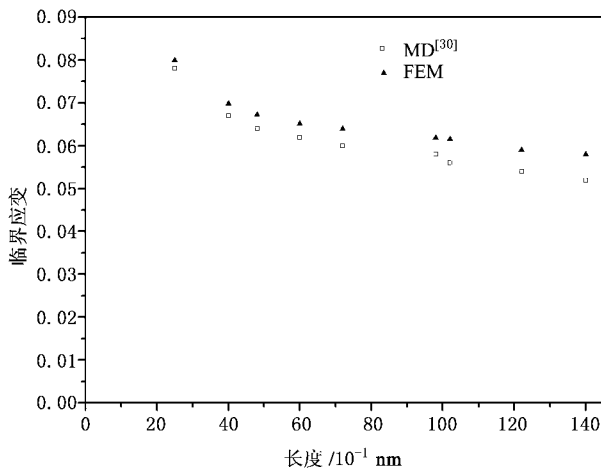


图 7 临界屈曲应变随管长变化关系

从图 6 可以看出,有限元计算的结果略高于 Liew 等^[30]的分子动力学计算结果,主要原因是在有限元分析中碳纳米管被当作无缺陷的连续完善壳体,但在分子动力学模拟中,单壁碳纳米管是一族沿圆柱面分布的离散碳原子,单壁碳纳米管中每个碳原子的准确坐标由总势能的最小值确定,能量最小化并不一定意味着所有碳原子完全对称的分布,微小的局部几何缺陷是不可避免的.因此,分子动力学模拟得到的临界屈曲载荷略小于有限元数值模拟

为了能更清楚地阐述这一观点,图 6 给出了锯

的结果.

事实上,基于 Donnell 方程的经典壳体理论也能够用于分析碳纳米管的屈曲.取单层圆柱壳的长度为 L ,半径为 R ,壁厚为 t ,弹性模量为 E ,泊松比为 ν .假设 m 和 n 分别为轴向和环向波数,则可以得到圆柱壳的临界屈曲应变为

$$\epsilon_{cr} = -\frac{N}{Et} = \frac{D}{Et} \left(\frac{m\pi}{L} \right)^{-2} \left[\left(\frac{m\pi}{L} \right)^2 + \left(\frac{n}{R} \right)^2 \right]^2 + \frac{1}{R^2} \left[\frac{\left(\frac{m\pi}{L} \right)}{\left(\frac{m\pi}{L} \right)^2 + \left(\frac{n}{R} \right)^2} \right]^2, \quad (5)$$

进一步可以得到圆柱壳的临界屈曲载荷为

$$P_{cr} = 2\pi r t E \epsilon_{cr} = \frac{2\pi r E t^3}{1 \times (1 - \nu^2)} \left(\frac{m\pi}{L} \right)^{-2} \left[\left(\frac{m\pi}{L} \right)^2 + \left(\frac{n}{R} \right)^2 \right]^2 + \frac{2\pi t E}{R} \left[\frac{\left(\frac{m\pi}{L} \right)}{\left(\frac{m\pi}{L} \right)^2 + \left(\frac{n}{R} \right)^2} \right]^2. \quad (6)$$

使用弹性壳体模型预测碳纳米管临界屈曲载荷的关键是参数的选取.一些研究者建议采用石墨板的层间距作为单壁碳纳米管的等效厚度,即 $t = 0.34$ nm.但是如果取 $t = 0.34$ nm,由方程(6)得到的临界屈曲载荷明显大于分子动力学和有限元的计算结果.因此,Liew 等^[30]建议取碳原子的直径 0.154 nm 作为碳纳米管的壁厚,弹性模量按 Wong 等^[27]的实验测量结果取 $E = 1.28$ TPa.因为临界屈曲载荷对泊松比不敏感,我们仍按 Liew 等的建议取 $\nu = 0.25$.则使用方程(6)可以得到锯齿形单壁碳纳米管的临界屈曲载荷 P_{cr} ,如图 6 中的实线所示.Liew 等^[30]指出,用方程(6)得到的临界屈曲载荷在直径为 0.549 nm—4.31 nm 时和分子动力学的结果符合较好,即用经典壳体理论计算临界屈曲载荷时存在一个最优直径范围.事实上,如果选定弹性模量 E 、壁厚 t 和泊松比 ν ,固定圆柱壳的长径比,用经典壳体理论得到的临界屈曲载荷对半径的变化并不敏感.从图 6 可以看出,直径为 1.959 nm—4.31 nm 或者更大时,采用经典壳体理论得到的临界屈曲载荷和分子动力学以及有限元计算结果十分接近.当半径较小时,即圆柱壳的厚径比 $t/R > 0.66$ 时,碳纳米管更接近于欧拉杆,因此,应采用两端固支边界条件的杆的欧拉公式

$$P_{cr} = \frac{4\pi^2 EI}{L^2} \quad (7)$$

来预测碳纳米管的临界屈曲载荷.图 6 中给出了用 Liew 等^[30]建议的参数($E = 1.28$ TPa, $t = 0.154$ nm)和 Yakobson 等^[5]建议的参数($E = 5.5$ TPa, $t = 0.066$ nm)代入方程(7)得到的计算结果,可以看出,用 $E = 5.5$ TPa, $t = 0.066$ nm 比 $E = 1.28$ TPa, $t = 0.154$ nm 能更好地预测单壁碳纳米管的临界屈曲载荷.在直径为 0.313 nm—1.176 nm 时,欧拉公式能很好地预测单壁碳纳米管的临界屈曲载荷.从图 6 还可以看出,如果固定长径比,在一定的直径范围内,经典壳体理论和欧拉公式都不能很好地预测碳纳米管的临界屈曲载荷,也就是在壳体模型向欧拉模型过渡时,两种模型都不能很好地预测临界屈曲载荷,但是有限元计算结果在整个范围内可以很好地预测碳纳米管的临界屈曲载荷,由此可以看出有限元方法是研究碳纳米管非线性力学行为的强有力的工具之一.

图 7 给出了(10,10)单壁碳纳米管临界屈曲应变随管长变化的有限元计算结果和分子动力学计算结果^[26]的对比.本文计算了管长为 2.46 nm—14.0 nm 的临界屈曲应变的变化情况,可以看出有限元计算结果和分子动力学结果符合较好.图 7 表明随着管长的增加,临界屈曲应变 ϵ_{cr} 逐渐减小.

4.2. 单壁碳纳米管的纯弯屈曲

有限元数值模拟过程中,在碳纳米管的两个端面分别施加刚性面以保证其端面形状不发生改变,同时又能保证变形后的轴线与端面保持垂直.弯曲变形由位移载荷控制,边界条件和 Cao 等^[31]的分子动力学模拟方法是一致的.

定义弯曲角度 θ ,指变形后的单壁碳纳米管的轴线与初始位置的夹角,其临界弯曲角为 θ_{cr} ,定义碳纳米管的临界弯曲屈曲曲率为

$$\kappa_{cr} = \theta_{cr}/L, \quad (8)$$

L 为碳纳米管的长度,设碳纳米管的直径为 d ,那么单壁碳纳米管的临界弯曲屈曲应变为

$$\epsilon_{cr} = \kappa_{cr} \cdot d/2. \quad (9)$$

Yakobson 等^[5]认为碳纳米管在弯曲载荷作用下的临界屈曲应变值和轴向压缩下的临界屈曲应变值是相当的,即

$$\epsilon_{cr-bending} = \epsilon_{cr-comp} = \frac{2}{\sqrt{3(1-\nu^2)}} \frac{t}{d}, \quad (10)$$

这里 t 和 d 分别表示单壁碳纳米管的厚度和直径,如果 $\nu = 0.19$,那么

$$\epsilon_{cr-bending} \approx 1.176 \frac{t}{d}. \quad (11)$$

由此可以得到单壁碳纳米管的临界弯曲屈曲曲率为

$$\kappa_{cr-bending} = 2\epsilon_{cr-bending}/d = 2.352 \frac{t}{d^2}. \quad (12)$$

Yakobson 认为临界弯曲屈曲曲率与碳纳米管的长度无关,与 t/d^2 成正比.

Iijima 等^[2]研究了单壁碳纳米管的弯曲屈曲曲率随管长、直径以及手性的变化关系,他们的研究表明临界曲率与管长无关,而且当碳纳米管的直径 $d > 2 \text{ nm}$ 时,碳纳米管的螺旋性对碳纳米管力学性能的影响小于 1%,几乎可以忽略.临界曲率可用下式表示:

$$C_s = \frac{1.49}{d^2} \left[1 + \frac{9.89}{d^5} 10^3 \cos(6\theta) \right], \quad (13)$$

临界弯曲屈曲曲率的单位为 $1/\text{nm}$, d 是碳纳米管的直径,单位为 nm . θ 是碳纳米管的螺旋性, ρ 表示锯齿形碳纳米管, $\pi/6$ 表示扶手椅型碳纳米管,介于 0 和 $\pi/6$ 之间表示一般类型的碳纳米管.

Cao 等^[31]利用分子动力学方法也给出了计算单壁碳纳米管的临界弯曲屈曲曲率的计算公式为

$$\kappa_{cr-bending} = 0.0738/d^2. \quad (14)$$

我们采用同 Cao 等^[31]一样的碳纳米管模型,利用有限元方法研究了长度 $L = 24 \text{ nm}$ 的扶手椅型单壁碳纳米管临界弯曲屈曲曲率随直径的变化关系,表 3 给出了本文计算结果和 Cao 等^[31]计算结果的对比.

表 3 长度 $L = 24 \text{ nm}$ 的不同半径的单壁碳纳米管的临界弯曲屈曲曲率

(n, m)	直径 d/nm	临界弯曲屈曲曲率 $\kappa_{cr}/\text{nm}^{-1}$	
		Cao 等 MD 结果	本文 FEM 结果
(10, 10)	1.357	0.038	0.0357
(15, 15)	2.036	0.017	0.0144
(20, 20)	2.715	0.009	0.00768

图 8 给出了 $L = 24 \text{ nm}$ 的扶手椅型单壁碳纳米管的临界弯曲屈曲曲率随直径的变化关系,图中包括了本文有限元计算结果、Cao 等^[31]、Yakobson 等^[5]和 Iijima 等^[2]分子动力学的计算结果.本文有限元得到的临界弯曲屈曲曲率与直径的关系可拟合为

$$\kappa_{cr-bending}^{FEM} = 0.0643/d^2. \quad (15)$$

从图 8 中可以看出, Cao 等、Yakobson 等和 Iijima 等利用分子动力学方法得到的碳纳米管弯曲的临界屈曲曲率与碳纳米管直径的平方成反比,本文的有限元计算结果同样预测出碳纳米管的临界弯曲屈曲曲率与碳纳米管直径的平方成反比.本文中

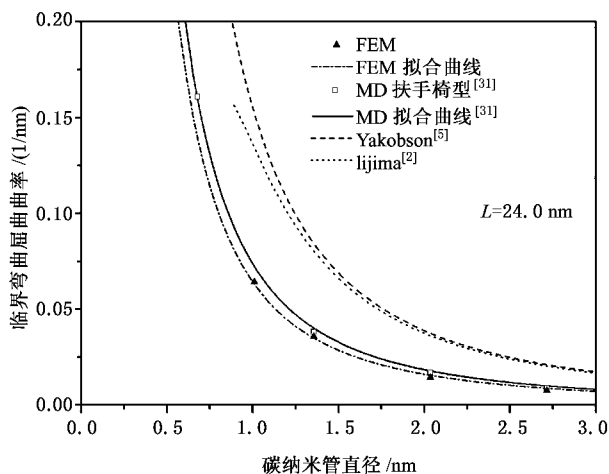


图 8 单壁碳纳米管的临界弯曲屈曲曲率随直径的变化关系

碳纳米管的长度和 Cao 等选取的长度是相同的,因此本文的有限元计算结果更接近于 Cao 等分子动力学的计算结果,验证了有限元方法模拟纳米尺度力学问题的可靠性,再次表明有限元方法是模拟纳米尺度问题的强有力的工具.本文计算结果与 Yakobson 等^[5]和 Iijima 等^[2]的计算结果有一定的差异,其原因是本文的有限元计算结果包含了长度效应,而 Yakobson 等和 Iijima 等都认为碳纳米管的临界曲率与管长无关.

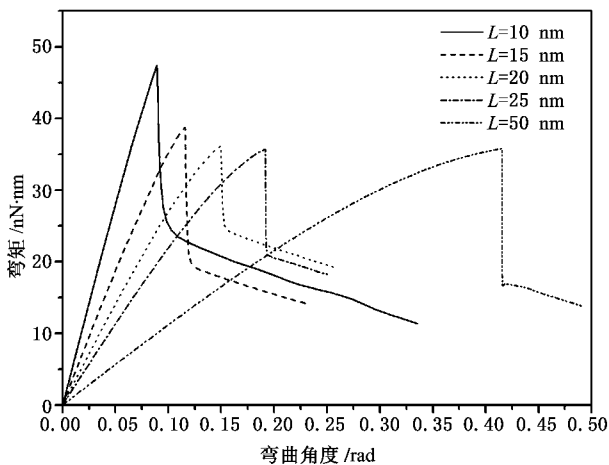


图 9 弯矩随弯曲角度的变化关系

图 9 给出了不同长度的(20, 20)单壁碳纳米管的弯矩随弯曲角度的变化关系,从图中可以看出,随着碳纳米管长度的增加,临界载荷逐渐减小,临界弯曲角度逐渐增大.在临界屈曲发生前,弯矩同弯曲角度基本呈线性关系变化,当达到临界弯曲角度时,弯矩不再增大,随着弯曲角度的继续增大,弯矩突然下降,进入后屈曲状态.可以看出,碳纳米管的弯曲屈

曲具有不稳定的后屈曲路径。

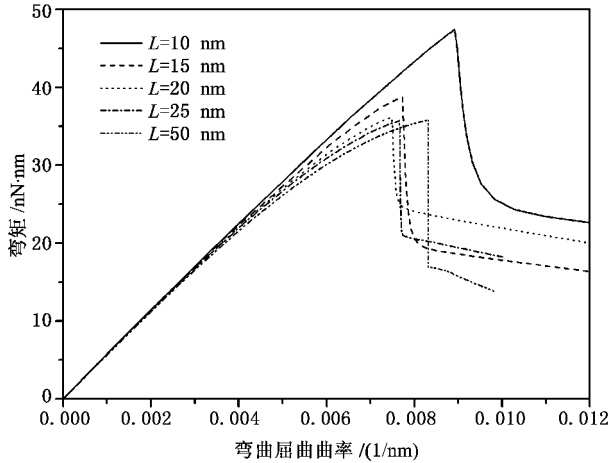


图 10 弯矩与弯曲屈曲曲率的关系

图 10 进一步给出了不同长度的(20,20)单壁碳纳米管的弯矩随弯曲屈曲曲率的变化关系,从图中可以看出,碳纳米管的长度对临界屈曲曲率有一定的影响,但是影响不大,基本在 $\kappa_{cr} = 0.008$ 附近变化。

图 11 给出了不同长度的(20,20)单壁碳纳米管在初始屈曲状态时的几何构型。从图中可以看出,不同长度的单壁碳纳米管的屈曲构型是不相同的。当碳纳米管的长度 $L = 15$ nm 时,在碳纳米管的中部仅有一个局部的跳跃(snap)屈曲(纽结);当碳纳米管的长度 $L \geq 25$ nm 时,两个对称的跳跃屈曲同时发生在碳纳米管的两端,管长 $L = 25$ nm 时,纽结的位置与碳纳米管的端部之间的距离是 9.6 nm,管长 $L = 50$ nm 时,纽结的位置与碳纳米管的端部之间的距离是 13.9 nm。对形成两个对称跳跃屈曲的碳纳米管而言,随着碳纳米管管长的增加,纽结的位置与碳纳米管的端部之间的距离增大。当碳纳米管的长度 $L = 20$ nm 时,在碳纳米管的中部形成三个相邻的纽结(跳跃屈曲),进一步从图 12 可以看出,随着弯曲角度的增加,三个纽结并没有合并成为单个纽结,而是形成三个更深的纽结。研究结果表明,随着管长的减小,两个对称的纽结逐步向碳纳米管的中部靠近,但是存在一个临界长度 L ,使得碳纳米管在弯曲过程中形成三个纽结,当管长小于这个临界值时,对称的两个纽结合并为单个纽结。

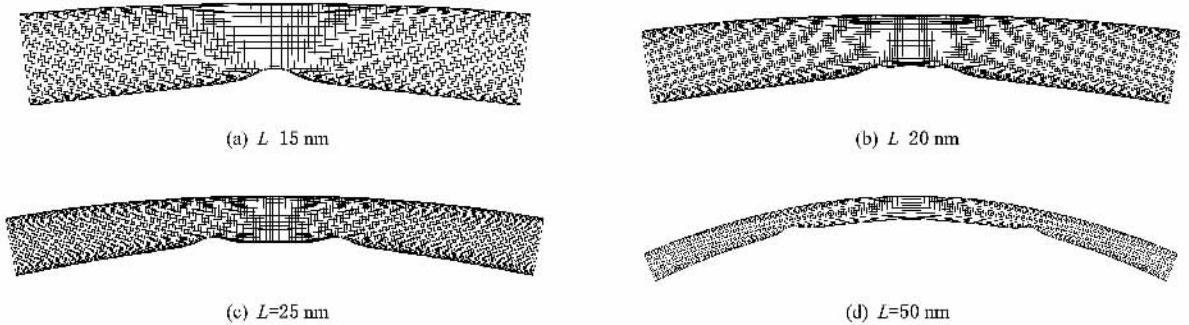


图 11 不同长度的(20,20)单壁碳纳米管在初始屈曲状态时的几何构型

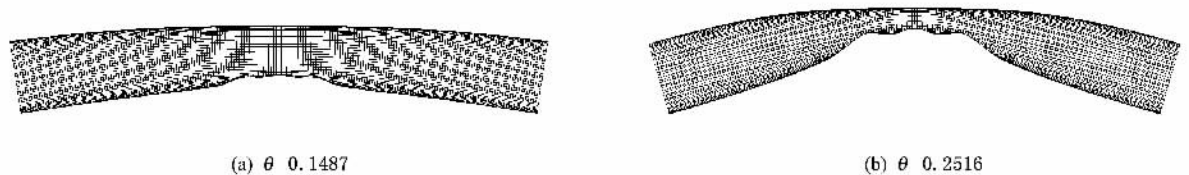


图 12 $L = 20$ nm 的(20,20)单壁碳纳米管不同屈曲状态时的后屈曲构型

5. 结 论

本文使用有限元方法系统地研究了单壁碳纳米管的轴压屈曲和弯曲屈曲行为,并将有限元模拟结

果和分子动力学模拟结果进行了比较。研究结果表明:1)有限元方法得到的计算结果和分子动力学的模拟结果符合较好,验证了有限元方法的有效性。2)本文有限元计算结果同 Liew 等^[26]的分子动力学计算结果均表明:随着单壁碳纳米管直径 d 的增大,

临界屈曲载荷迅速增大,存在最优直径 d 。随着直径 d 的增加,临界屈曲载荷 P_{cr} 缓慢减小,最后趋于一个稳定的值。³⁾ 单壁碳纳米管的临界弯曲屈曲曲率与碳纳米管直径的平方成反比,弯曲屈曲应变与直径成反比。⁴⁾ 在弯曲载荷作用下,随着单壁碳纳米管管长的减小,两个对称的纽结逐步向碳纳米管的中部靠近,对称的两个纽结可能合并为单个纽结,存在

一个临界长度 L ,使得单壁碳纳米管在弯曲过程中形成三个纽结。⁵⁾ 单壁碳纳米管在轴压和弯曲载荷作用下具有不稳定的后屈曲路径。研究结果同时表明合理地选择碳纳米管的弹性模量和壁厚,有限元方法能够很好地解释碳纳米管的屈曲机理。这意味着在模拟大尺度的纳米力学问题时,有限元方法将会成为更加准确和快捷的数值模拟方法。

- [1] Iijima S 1991 *Nature* **354** 56
- [2] Iijima S, Brabec C, Maiti A, Bernholc J 1996 *J. Chem. Phys.* **104** 2089
- [3] Treacy M M J, Ebbesen T W, Gibson J M 1996 *Nature* **381** 678
- [4] Postma H W, Teepen T, Yao Z, Grifoni M, Dekker C 2001 *Science* **292** 76
- [5] Yakobson B I, Brabec C J, Bernholc J 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 2511
- [6] Liew K M, Wong C H, He X Q, Tan M J, Meguid M A 2004 *Phys. Rev. B* **69** 115429
- [7] Liew K M, He X Q, Wong C H 2004 *Acta. Mater.* **52** 2521
- [8] 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]
- [9] Wang Y, Wang X X, Ni X G, Wu H A 2005 *Comp. Mater. Sci.* **32** 141
- [10] Wang Y, Ni X G, Wang X X, Wu H A 2003 *Chin. Phys.* **12** 1007
- [11] Chen W, Luo C L 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 386 (in Chinese) [陈伟、罗成林 2006 物理学报 **55** 386]
- [12] Ruoff R S, Tersoff J, Lorents D C, Subramoney S, Chan B 1993 *Nature* **364** 514
- [13] Hernandez E, Goze C, Bernier P, Rubio A 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 4502
- [14] Sanchez-Portal D, Artacho E, Soler M 1999 *Phys. Rev. B* **59** 12678
- [15] Ru C Q 2001 *J. Mech. Phys. Solids.* **49** 1265
- [16] Han Q, Lu G X 2003 *Euro. J. of Mech. A-solids* **22** 875
- [17] Han Q, Lu G X, Dai L M 2005 *Compos. Sci. Technol.* **65** 1337
- [18] Yao X H, Han Q 2007 *Euro. J. of Mech. A-solids* **26** 20
- [19] He X Q, Kitipomchai S, Liew K M 2005 *J. Mech. Phys. Solids.* **53** 303
- [20] Xie G Q, Han X, Long S Y, Tian J H 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 226 (in Chinese) [谢根全、韩旭、龙述尧、田建辉 2005 物理学报 **54** 226]
- [21] Ru C Q 2000 *Phys. Rev. B* **62** 9973
- [22] Zhou X, Zhou JJ, Ouyang Z C 2000 *Phys. Rev. B* **62** 13692
- [23] Tu Z, Ou-Yang Z 2002 *Phys. Rev. B* **65** 233
- [24] Kundin K N, Scuseria G E, Yakobson B I 2001 *Phys. Rev. B* **64** 235
- [25] Pantano A, Boyce M C, Parks D M 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 145504
- [26] Krishnan A, Dujardin E, Ebbesen T W, Yianilos P N 1998 *Phys. Rev. B* **58** 14013
- [27] Wong E W, Sheehan P E, Lieber C M 1997 *Science* **277** 1971
- [28] Solares S, Blanco M, Goddard WA 2004 *Nanotechnology* **15** 1405
- [29] Ni B, Sinnott SB, Mikulski PT, Harrison JA 2004 *Phys. Rev. Lett.* **88** 205505
- [30] Liew KM, Wong CH, He XQ, Tan MJ, Meguid S A 2004 *Phys. Rev. B* **69** 115429
- [31] Cao G X, Chen X 2006 *Phys. Rev. B* **73** 155435

Numerical simulation of nonlinear mechanical behaviour of single-walled carbon nanotubes^{*}

Yao Xiao-Hu Han Qiang[†] Xin Hao

(Department of Mechanics , College of Traffic and Communications , South China University of Technology , Guangzhou 510640 , China)

(Received 10 May 2007 ; revised manuscript received 5 June 2007)

Abstract

The mechanical behavior of single-walled carbon nanotubes (SCWNTs) is one of the basic properties of the nanotube composite and nano machinery. The axial and bending buckling behavior of SWCNTs is systematically investigated by finite element method (FEM) in this paper. The results of molecular dynamics and FEM simulations are compared. Simulation results show that the axial buckling loads are dependent strongly on the diameter , and the buckling and postbuckling behavior of SWCNTs under bending depends strongly on the length and radii of the tube. With appropriate choice of Young 's modulus and tube thickness , the FEM simulation provides some useful insight into the buckling mechanism of carbon nanotubes. The finite element method turns out to be a new , forthright and precise method for the simulation in solving large-scale nano-mechanics problems.

Keywords : nanotube , nonlinear mechanics behaviour , finite element method

PACC : 4620 , 4630L , 6148

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10672059) and the Natural Science Foundation of Guangdong Province of China (Grant No. 06025689).

[†] E-mail : emqhan@scut.edu.cn