

轴向冲击载荷作用下双壁碳纳米管的动力屈曲*

姚小虎[†] 张晓晴 韩 强

(华南理工大学土木与交通学院工程力学系, 广州 510640)

(2010年9月29日收到; 2010年11月25日收到修改稿)

应用改进的有限元方法, 建立考虑层间范德华力作用的壳-弹簧非线性有限元模型, 基于 B-R 运动准则, 系统地研究了双壁碳纳米管的动力屈曲问题, 得到了轴向冲击载荷作用下双壁碳纳米管的临界动力屈曲载荷和临界动力失效载荷. 研究表明, 在动力屈曲过程中, 双壁碳纳米管层间距的变化非常小, 各管的变形相互协调; 碳纳米管中应力波的传播导致碳纳米管出现非对称屈曲模态, 可明显观测到四个环向波瓣, 沿着碳纳米管的轴线方向, 四个波瓣的波峰和波谷交替变化. 对碳纳米管动力屈曲问题的研究表明, 冲击载荷的大小和持续时间对碳纳米管的动力屈曲有较大影响, 同时碳纳米管的长度对碳纳米管的动力屈曲也有较大的影响, 较短的碳纳米管较早出现非对称屈曲模态.

关键词: 碳纳米管, 动力屈曲, 冲击载荷

PACS: 62. 20. mq, 63. 22. Gh

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, 5-11], 包括经典分子动力学方法 (MD)^[2, 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), 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. 在经典的分子动力学模拟 (MD) 中, 由于电子的所有自由度和量子效应被忽略了, 需要考虑更加精确的描述方法, 如电子之间的势、离子之间的势以及离子和离子之间的相互作用. 密度泛函分子动力学 (DFTMD) 克服了经典分子动力学的缺点, 可以详细地考虑电子之间、离子之间和电子与离子之间的相互作用, 但是 DFTMD 虽有足够高的计算精度但其计算量过于庞大. Car-Parrinello 分子动力学模拟 (CPMD) 能够将经典分子动力学方法和量子力学结合起来, 在 DFT 的框架下考虑了电子的自由度, 平衡了计算精度和计算效率之间的矛盾, 同时考虑了动力学效应^[14]. 对于较大尺寸碳纳米管的非线性力学性能的研究, 改进的有限元方法比分子动力学方法具有更广泛的适用性, 同时可以克服分子动力学方法引起的计算规模大、计算耗时等缺点. 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, 他们发现连续壳体模型能够预测分子动

* 国家自然科学基金 (批准号: 10902040/A020602), 广东省自然科学基金 (批准号: 8451064101000229), 教育部高校博士点基金和华南理工大学中央高校基金 (批准号: 2009ZM0238, 2009ZM0280), 广东省高校优秀青年创新人才培养计划 (批准号: LYM08016) 和广东省优秀博士学位论文作者资助项目资助的课题.

[†] E-mail: yaohx@scut.edu.cn

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. 姚小虎等^[16-18]研究了碳纳米管的轴压、弯曲和扭转屈曲行为, 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. 谢根全等^[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. 许多学者在理论、试验和数值模拟方面对碳纳米管的屈曲性能进行了研究, 但是碳纳米管在动态载荷作用下的动力屈曲问题至今尚无人涉及.

由于时间参数的引入, 结构在冲击载荷作用下的动力屈曲问题远较静态屈曲问题复杂, 此外, 由于需要考虑碳纳米管层间非线性范德华力的作用, 使得这一问题的研究具有更大的难度和复杂性. 因此, 本章将应用改进的有限元方法, 建立考虑范德华力作用的弹性壳-弹簧非线性模型, 对双壁碳纳米管进行非线性动力响应分析, 进而对双壁碳纳米管在轴向冲击载荷作用下的弹性动力屈曲问题进行详细的研究.

2. 壳-非线性弹簧模型

多壁碳纳米管层间的范德华力是非化学键的作用, 范德华力随着原子间距离的变化而变化, 表现出很强的非线性. 范德华力的作用采用 Lennard-Jones “6-12”(L-J) 势函数来描述. 原子之间的非键 L-J 势能可表为

$$U(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (1)$$

其中, r 是层间距离, ε 和 σ 是 Lennard-Jones 参数. $\varepsilon = 0.0556 \text{ kcal/mol}$, $\sigma = 0.34 \text{ nm}$ ($1 \text{ cal} = 4.190 \text{ J}$). 当原子间距离大于 2.5σ 时, 范德华力的作用非常弱, 可以忽略不计. 但是 L-J 势是用来描述离散原子之间的相互作用, 因此上式不能直接应用于有限元模型, 我们将 Lennard-Jones 势函数对 r 求导即可得到范德华力与 r 的关系式如下:

$$F(r) = -\frac{dU(r)}{dr} = 24 \frac{\varepsilon}{\sigma} \left[2 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{13} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^7 \right]. \quad (2)$$

图 1 给出了 Lennard-Jones 势和范德华力随原子间距离的变化关系, 从图中可以看出, 原子间的范德华力是高度非线性的. 本文采用 LS-DYNA3D 软件中的非线性弹簧模拟原子间范德华力的相互作用. 图 2 给出了采用 L-J 势函数得到的范德华力

随原子间距离的变化关系和用非线性弹簧单元模拟得到的结果的比较, 从图中可以看出, 计算结果非常符合, 证实了我们采用非线性弹簧模拟碳纳米管层间范德华力作用的合理性.

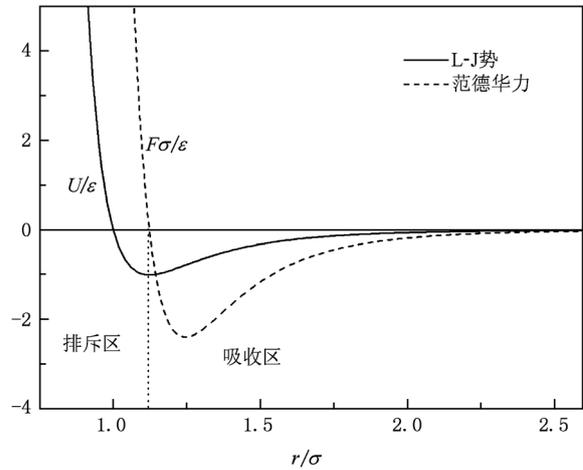


图 1 L-J 势和范德华力随原子间距离的变化关系

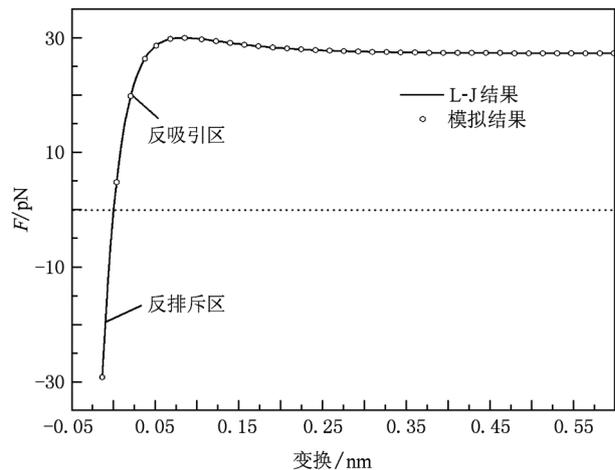


图 2 非线性弹簧模拟范德华力

3. 动力屈曲有限元模型

Budiansky 和 Roth 在研究球壳的动力稳定性时, 通过运动方程直接求解位移和载荷的关系. 他们认为: 如果所加载荷的微小增量可以导致结构响应的一个巨大变化, 则所对应的载荷便是临界载荷. B-R 运动准则实质上是对结构进行非线性动力响应分析, 进而确定 $P-Y$ 曲线的性态, 这里 P 为载荷参数, Y 为动力响应特征参数. 对于后屈曲路径是不稳定的情形, 无疑准则是成立的, 而且一般地可

给出较为准确的临界载荷值,然而如果后屈曲路径是稳定的,则准则的应用尚有一定的困难. 轴向载荷作用下的圆柱壳具有不稳定的后屈曲平衡路径^[18],因此我们采用 B-R 运动屈曲准则对双壁碳纳米管在轴向冲击载荷作用下的动力屈曲问题进行研究.

本文将对 (30, 30) (35, 35) 双壁碳纳米管进行动力屈曲分析,其几何参数为:双壁碳纳米管的内半径 $R = 2.036 \text{ nm}$,壁厚 $t = 0.066 \text{ nm}$,长度 $L = 6 \text{ nm}$;材料参数为:密度 $\rho = 1.3 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$,弹性模

量 $E = 5.5 \text{ TPa}$,泊松比 $\nu = 0.19$. 动力屈曲有限元计算中,通过调整网格的密度来控制计算结果的收敛性. 外管和内管的轴向、周向分别划分 56 等份和 104 等份,共 11648 个壳单元和 11856 个节点,厚度方向取 3 个点的积分以模拟壳体的面内弯曲效应. 壳单元采用 Belytschko-Tsay 积分形式,该壳单元基于 Mindlin-Reissner 壳体单元理论假设,能够很好地处理动力屈曲变形问题,同时能够考虑几何大变形效应. 范德华力采用非线性弹簧单元来描述,共划分 5928 个单元,11856 个节点,有限元模型如图 3 所示.

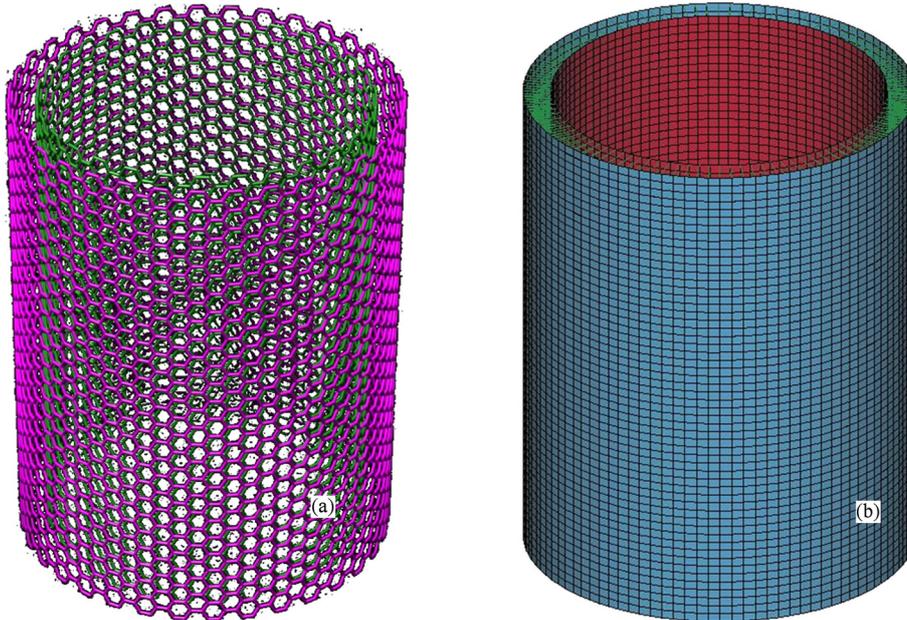


图 3 长度 $L=6 \text{ nm}$ 的 (30,30) (35,35) 双壁碳纳米管模型 (a) 分子结构示意图; (b) 动力屈曲有限元模型

双壁碳纳米管的位移边界条件为:在下端面约束所有平动自由度,上端面约束除轴向位移外的所有自由度. 在有限元模型上端部的节点施加沿轴线方向的理想阶跃载荷,其形式为

$$\bar{N}(t) = \begin{cases} -N_c, & (0 \leq t \leq \Delta t), \\ 0, & (t \geq \Delta t), \end{cases} \quad (3)$$

其中 N_c 是常数, Δt 是载荷持续时间. 我们将取不同的 N_c 和 Δt 来研究双壁碳纳米管的动力屈曲问题.

4. 计算结果分析

图 4 给出了 $N_c = 0.8 \text{ nN}$ 冲击载荷作用下距冲击端 $L/2$ 处横截面上 $\theta = 0^\circ, 45^\circ, 90^\circ, 135^\circ, 180^\circ, 225^\circ, 270^\circ$ 和 315° 的不同半径方向的径向位移随时间变化曲线. 从图中可以看出,在冲击载荷作用的

早期阶段,不同方向的径向位移大小是完全相同的,碳纳米管呈现轴对称变形模态,而且径向位移很小. 从 $0.383 \times 10^{-3} \text{ ns}$ 时刻到 $0.641 \times 10^{-3} \text{ ns}$ 时刻,不同方向的径向位移基本保持在 0.04 nm 左右,没有发生较大的变化,表现为“外凸”变形. 在 $0.540 \times 10^{-3} \text{ ns}$ 时,不同方向的径向位移不再呈现对称分布, $0^\circ, 90^\circ, 180^\circ, 270^\circ$ 处的径向位移与 $45^\circ, 135^\circ, 225^\circ, 315^\circ$ 的径向位移首次发生分岔,产生非轴对称屈曲变形,我们把发生非轴对称屈曲变形的时刻称作非轴对称临界屈曲时间. 在较大的轴向冲击载荷作用下,随着时间的持续, $0^\circ, 90^\circ, 180^\circ, 270^\circ$ 处的径向位移与 $45^\circ, 135^\circ, 225^\circ, 315^\circ$ 的径向位移明显不同,形成明显的非轴对称屈曲模态, $0^\circ, 90^\circ, 180^\circ, 270^\circ$ 处的变形表现为“内凹”变形,而 $45^\circ, 135^\circ, 225^\circ, 315^\circ$ 处的变形表现为“外凸”变形,碳纳

米管的屈曲构型不仅有轴向波长而且呈现出明显的周向波长. 为了进一步说明距冲击端 $L/2$ 处横截面上不同半径方向的径向位移的差异, 图 5 给出了 $\theta = 0^\circ$ 和 45° 方向的径向位移的比较以及典型时刻距冲击端 $L/2$ 处的横截面的构型图. 从图中可以看出, 存在三个典型的时刻, 即 t_0, t_1 和 t_2 . t_0 是碳纳米管发生非轴对称屈曲的临界时刻, 此时径向位移首次发生分岔; 在 $t_1 = 1.05 \times 10^{-3}$ ns 时刻, $0^\circ, 45^\circ$ 方向的径向位移都是首次达到最大值, 此时径向位移均为负值; 卸载后由于残余应力波的传播, 使得碳纳米管的径向位移进一步增大, 在 $t_2 = 1.37 \times 10^{-3}$ ns 时刻, 0° 方向的径向位移为正值, 而 45° 方向的径向位移达到负的最大值, 碳纳米管表面的周向屈曲波纹加深. 从距冲击端 $L/2$ 处的横截面在三个不同时刻的屈曲构型图可以看出, 随着时间的不断变化, 横截面的屈曲构型发生了很大变化.

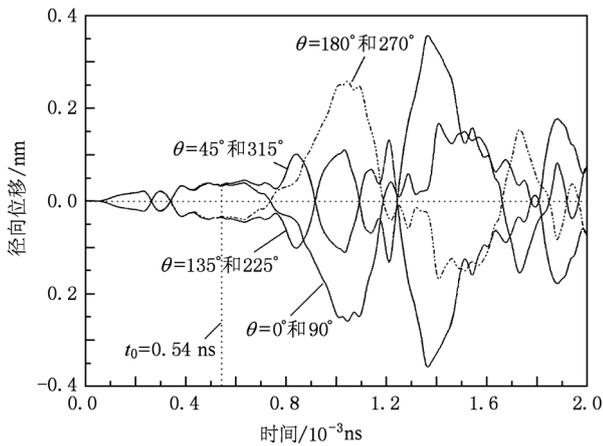


图 4 距冲击端 $L/2$ 处不同半径方向的径向位移随时间的响应曲线

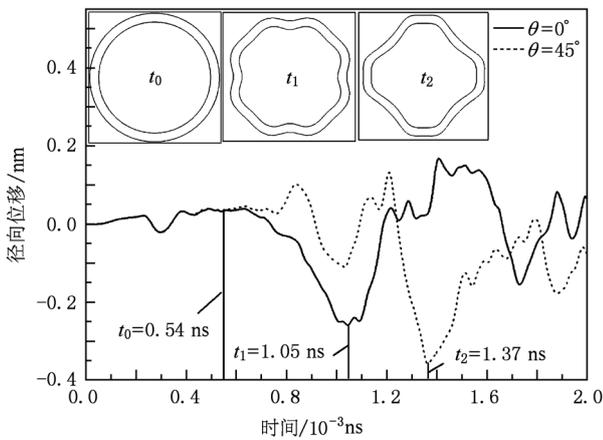


图 5 $\theta = 0^\circ$ 和 45° 方向的径向位移以及典型时刻的横截面构型图

图 6 给出了不同时刻碳纳米管的应力分布云图及其动力屈曲模态. 由于冲击载荷较大, 在冲击过程中首先发生轴对称屈曲, 然后由轴对称屈曲转化为非轴对称屈曲, 同时我们可以很清楚地看到应力波在碳纳米管内部的传播过程. 当碳纳米管端部受冲击载荷作用时, 在冲击端产生应力波, 并逐渐向固定端传播 (如图 (a)), 在 $t = 89 \times 10^{-6}$ ns 时刻应力波达到固定端 (如图 (b)), 接着, 应力波在固定端发生反射, 反射波向冲击端传播, 并与冲击端传来的后继应力波叠加, 使碳纳米管内应力增大, 在碳纳米管的表面形成明显的屈曲波纹, 非冲击端附近的屈曲波纹大于冲击端附近的屈曲波纹, 此时, 碳纳米管的轴向位移和径向位移基本上是对称的, 尽管周向位移响应呈现出强烈的非对称性, 但是由于周向位移远小于径向位移和轴向位移, 因此在该动力屈曲阶段可认为碳纳米管的屈曲模态为轴对称形式 (如图 6(c)). 经过后继应力波与反射应力波的反复作用, 屈曲波纹明显加深, 此时冲击端附近的径向位移大于非冲击端附近的径向位移, 在冲击端部形成屈曲波纹 (如图 6(d)). 波纹幅度不断发生变化而且最大幅值位置沿碳纳米管的轴向坐标不断发生变化. 在 $t = 540 \times 10^{-6}$ ns 时刻, 碳纳米管的径向位移不再呈现对称分布, 出现分岔现象, 是碳纳米管发生非对称动力屈曲的临界时刻. 随着冲击波和反射波的反复作用以及管壁间范德华力的相互作用, 双壁碳纳米管内外管的变形呈现出轴向和周向波长, 在碳纳米管的中部出现明显的非轴对称屈曲模态 (如图 6(e)), 冲击波卸载后, 在残余应力波的作用下, 屈曲变形的非对称性逐渐向碳纳米管的两端发展 (如图 6(f)), 而且周向波纹幅值加大, 明显的观测到四个环向波瓣, 沿着碳纳米管的轴线方向, 四个波瓣的波峰和波谷交替变化, 即在图 6(f) 中我们观测到的相邻的波瓣被旋转了 45° .

当碳纳米管的端部受到轴向冲击时, 我们参理想弹性壳体的一维弹性波理论, 弹性纵波波速 $c_e = \sqrt{E/\rho(1-\nu^2)}$, 弯曲波波速 $c_s = \sqrt{\kappa E/2\rho(1-\nu)}$, 其中 E 为碳纳米管的弹性模量, ρ 为碳纳米管的密度, ν 为碳纳米管的泊松比, κ 为折减系数. 取 $\rho = 1.3 \times 10^3$ kg/m³, $E = 5.5$ TPa, $\nu = 0.19$, $\kappa = 5/6$. 则碳纳米管的弹性纵波波速为 $c_e = 6.626 \times 10^4$ nm/ns, $c_s = 4.665 \times 10^4$ nm/ns. 本文所研究的 (30,30) (35,35) 双壁碳纳米管的长度 $L = 6$ nm, 因此可以计算出轴向应力波和弯曲波达到非冲击端的时间分别是

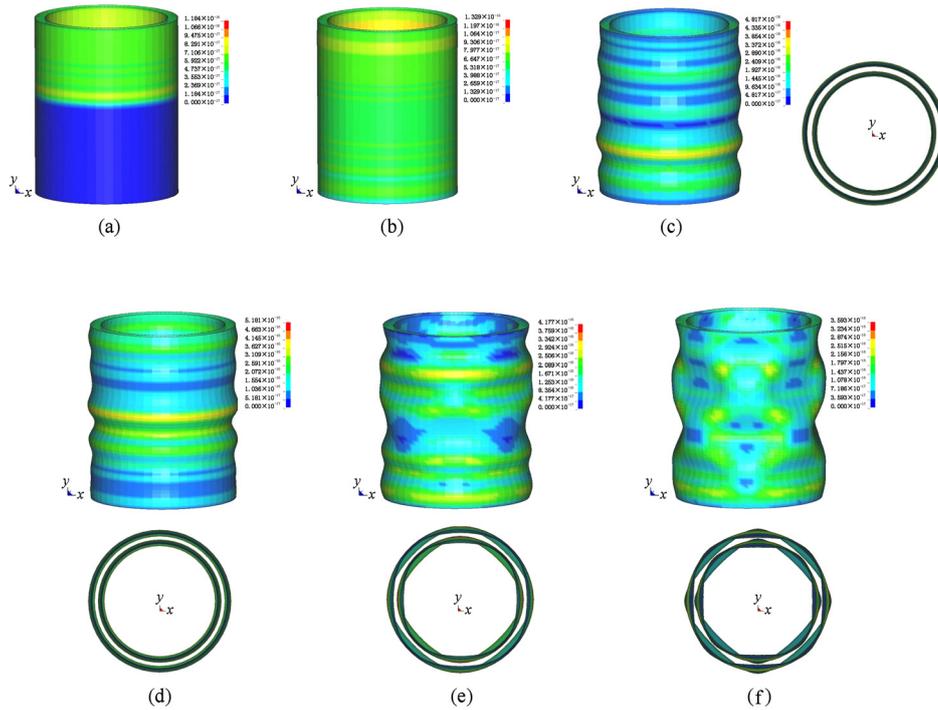


图6 不同时刻碳纳米管的应力分布云图及其动力屈曲模式 (a) $t = 40 \times 10^{-6}$ ns; (b) $t = 89 \times 10^{-6}$ ns; (c) $t = 390 \times 10^{-6}$ ns; (d) $t = 540 \times 10^{-6}$ ns; (e) $t = 800 \times 10^{-6}$ ns; (f) $t = 830 \times 10^{-6}$ ns

0.905×10^{-3} ns 和 1.286×10^{-3} ns. 当冲击载荷作用于碳纳米管的端部时,轴向应力波开始向非冲击端部传播,弯曲应力波同时发生. 应力波传播过程中,在初始阶段弯曲应力波分布均匀,到应力波传播后期,由于反射波和后继压缩波的相互叠加,周向应力波分布出现不均匀现象,轴向和周向同时形成屈曲波纹,这种屈曲模式通常被称为 Yoshimura 模式,如图 6(e) 和(f). 在冲击载荷作用下,碳纳米管不仅产生轴向应变,也产生与碳纳米管半径方向相关的周向应变,在屈曲前主要承受压缩应力波的作用,弯曲应力波沿碳纳米管长方向基本均匀分布,卸载后碳纳米管内则主要为弯曲应力波作用,弯曲应力波分布的不均匀性导致碳纳米管的轴对称屈曲模式向非轴对称屈曲模式的转化. 应力波在碳纳米管中的传播过程是非常复杂的,其传播机理还有待于进一步深入分析讨论.

对于动力载荷作用下的结构,确定其临界动力屈曲载荷有重要的意义. 由于时间参数的引入,使得动态屈曲问题较静态屈曲问题复杂了许多. 对于冲击屈曲问题而言,首要的是合理、实用的屈曲准则,它不仅要在物理上合理,又要在实际上可行,但遗憾的是恰好在这个问题上至今未能形成一致的

看法. 我们将采用 B-R 运动屈曲准则来研究碳纳米管的临界动力屈曲载荷.

图 7 给出了载荷持续时间 $\Delta t = 800 \times 10^{-6}$ ns 时碳纳米管的最大轴向平均位移随冲击载荷幅值的变化曲线. 从图 7 可以看出,当 $N_c \leq 0.7$ nN 时,双壁碳纳米管的轴向位移随着冲击载荷幅值的增加变化比较平缓,在这个范围内碳纳米管没有明显的屈曲模式,仅发生弹性动力响应. 当载荷幅值继续增加时,碳纳米管的轴向位移随着载荷的幅值的增加变化比较迅速,碳纳米管发生弹性动力屈曲,屈

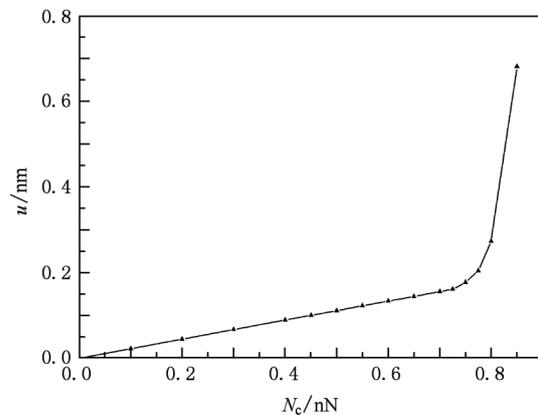


图7 冲击端最大轴向位移随冲击载荷幅值的变化曲线

曲模态开始为轴对称形式,然后转化为非轴对称形式. 当 $N_c \geq 0.8$ nN 时,载荷幅值的微小增加使得碳纳米管的轴向位移变化非常大,而且碳纳米管的屈曲模态为非轴对称形式,显然碳纳米管已经失去了继续承受载荷的能力,达到了承载极限,继续增加冲击载荷将导致屈曲变形的急剧增加从而诱发碳纳米管的坍塌破坏. 根据 B-R 屈曲准则,我们可以确定此双壁碳纳米管的临界动力屈曲载荷 $N_{cr}^{d1} = 0.7$ nN,临界动力失效载荷 $N_{cr}^{d2} = 0.8$ nN.

图 8 给出了在不同冲击载荷持续时间 $\Delta t = 200 \times 10^{-6}$ ns, 400×10^{-6} ns, 800×10^{-6} ns 和 1000×10^{-6} ns 作用下碳纳米管的冲击端最大轴向位移随冲击载荷幅值的变化曲线的比较. 从图中可以看出,在较小载荷作用下,载荷持续时间对碳纳米管的冲击端最大轴向位移是没有影响的. 当 $N_c \geq 0.7$ nN 时,载荷持续时间 Δt 为 200×10^{-6} ns 的碳纳米管冲击端的最大轴向位移与冲击载荷继续保持线性关系,而载荷持续时间 Δt 为 400×10^{-6} ns, 800×10^{-6} ns 和 1000×10^{-6} ns 的碳纳米管冲击端最大轴向位移与冲击载荷不再是线性关系,碳纳米管的冲击端最大轴向位移随着载荷的增加迅速增加,碳纳米管发生动力屈曲.

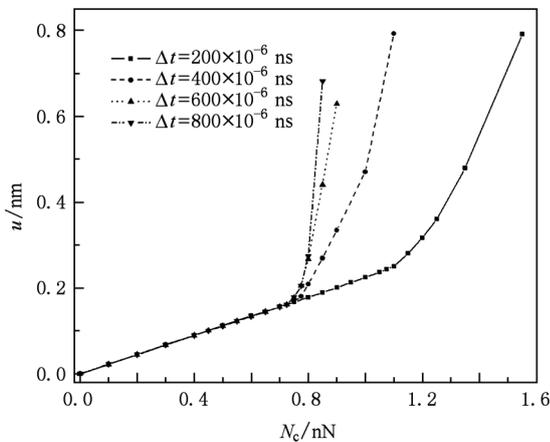


图 8 不同载荷持续时间下冲击端最大轴向位移随冲击载荷幅值的变化曲线

图 9 给出了碳纳米管临界动力屈曲载荷随载荷持续时间的变化关系,从图中可以看出,当载荷持续时间 $\Delta t < 400 \times 10^{-6}$ ns 时,碳纳米管的临界动力屈曲载荷随载荷持续时间的增加迅速减小;当载荷持续时间 $\Delta t \geq 400 \times 10^{-6}$ ns 时,随着载荷持续时间的增加,碳纳米管的临界动力屈曲载荷变化平缓.

图 10 给出了不同长度的碳纳米管在相同时刻

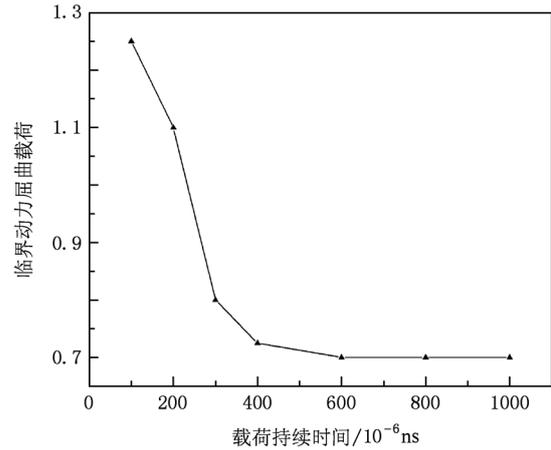


图 9 碳纳米管临界动力屈曲载荷随载荷持续时间的变化关系

的屈曲模态的对比. 其中图 10(a) 是长度 $L = 6$ nm 的碳纳米管在三个不同时刻的屈曲模态, (b) 是长度 $L = 12$ nm 的碳纳米管的屈曲模态. 从图中可以看出,在 390×10^{-6} ns 时,较短的碳纳米管沿轴向的屈曲波纹数多于较长的碳纳米管的屈曲波纹数,较长的碳纳米管仅在非冲击端附近和 $0.28L$ 处形成屈曲波纹. 在 540×10^{-6} ns 时,较短的碳纳米管沿轴向的屈曲波纹发生变化,在冲击端形成屈曲波纹,非冲击端的波纹消失,而较长的碳纳米管在非冲击端部的屈曲波纹加深,并且沿轴向形成较多的屈曲波纹. 在 830×10^{-6} ns 时,较短的碳纳米管呈现出非对称屈曲模态,明显的观测到四个环向波瓣,沿着碳纳米管的轴线方向,四个波瓣的波峰和波谷交替变化,相邻的波瓣被旋转了 45° . 较长的碳纳米管只是沿轴向的屈曲波纹数目继续增多,而且屈曲波纹加深. 说明较长的碳纳米管可以通过增加轴向压缩变形和形成局部屈曲吸收能量.

5. 结 论

本文应用改进的有限元方法,建立考虑层间范德华力作用的壳-弹簧非线性有限元模型,基于 B-R 运动准则,系统地研究了双壁碳纳米管的动力屈曲问题,得到了轴向冲击载荷作用下双壁碳纳米管的临界动力屈曲载荷和临界动力失效载荷. 研究表明,在动力屈曲过程中,双壁碳纳米管层间距的变化非常小,各管的变形相互协调;碳纳米管中应力波的传播导致碳纳米管出现非对称屈曲模态,可明显观测到四个环向波瓣,沿着碳纳米管的轴线方向,四个波瓣的波峰和波谷交替变化. 对不同情况碳纳米管动力屈

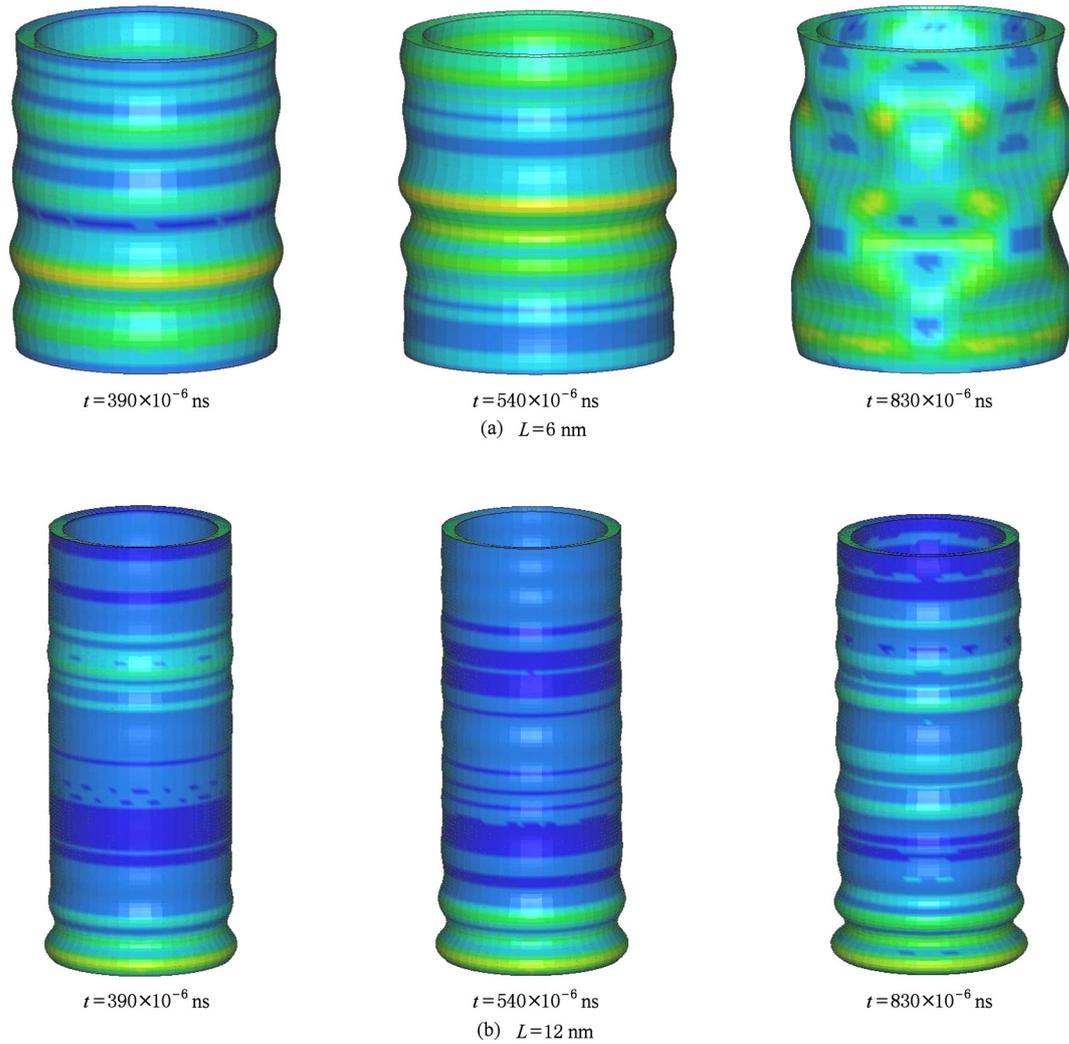


图 10 不同长度的碳纳米管的屈曲模式的对比

曲问题的研究表明,冲击载荷的大小和持续时间对碳纳米管的动力屈曲有较大影响,同时碳纳米管的长度

对碳纳米管的动力屈曲也有较大的影响,较短的碳纳米管较早出现非对称屈曲模式。

- [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] Zang J L, Yuan Q, Wang F C 2009 *Computational Materials Science* **46** 621

- [15] Ru C Q 2001 *J. Mech. Phys. Solids* **49** 1265
- [16] Yao X H, Han Q, Xin H 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 329 (in Chinese) [姚小虎、韩强、辛浩 2008 物理学报 **57** 329]
- [17] Yao X H, Han Q 2008 *Computational Materials Science* **43** 579
- [18] Yao X H, Han Q 2007 *Euro. J. of Mech. A-solids* **26** 20
- [19] He X Q, Kitipornchai 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]

Dynamic buckling of double-walled carbon nanotubes under axial impact loading*

Yao Xiao-Hu[†] Zhang Xiao-Qing Han Qiang

(Department of Engineering Mechanics, School of Civil Engineering and Transportation, South China University of Technology, Guangzhou 510640, China)

(Received 29 September 2010; revised manuscript received 25 November 2010)

Abstract

Using the modified finite element method, the nonlinear shell-spring finite element model is established with taking the van der waals force into account. Based on the B-R motion criterion, the dynamic buckling behaviors of multi-walled carbon nanotubes are examined systemically. The dynamic critical loads for buckling and failure of double-walled carbon nanotubes under axial impact load are obtained. It is shown that in the dynamic buckling process of multi-walled carbon nanotubes, the deformation of each wall is harmonious to each other and the change of interlayer spacing is very small. The magnitude and the duration of impact load as well as the length of carbon nanotube have greater effects on the dynamic buckling of carbon nanotubes. For the shorter carbon nanotubes, asymmetrical buckling mode appears earlier. The simulations further show that the stress wave propagation in carbon nanotubes induces the asymmetrical buckling mode. In the dynamic buckling process of carbon nanotubes, there are four circumferential lobes that can be observed obviously, and their wave crest and trough of the lobes change alternately.

Keywords: carbon nanotubes, dynamic buckling, impact loading

PACS: 62. 20. mq, 63. 22. Gh

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10902040/A020602), the Natural Science Foundation of Guangdong Province of China (Grant No. 8451064101000229), the Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education (New Teachers), the Fundamental Research Funds for the Central Universities (Grant Nos. 2009ZM0238, 2009ZM0280), the Foundation for Distinguished Young Talents in Higher Education of Guangdong (LYM08016), and the Foundation for Outstanding Doctoral Dissertation of Guangdong.

[†] E-mail: yaohx@scut.edu.cn