

文章编号: 1001-1455(2006)01-0079-05

冲击扭矩作用下碳纳米管动力屈曲的研究*

沙风焕, 赵隆茂, 杨桂通

(太原理工大学应用力学研究所, 山西 太原 030024)

摘要: 为了研究碳纳米管在冲击扭矩作用下的动力屈曲, 采用了连续模型将碳纳米管模拟成半无限长的弹性连续圆柱壳。将冲击扭矩作用下碳纳米管的动力屈曲问题归结为由于扭转应力波传播导致的分叉问题, 此分叉问题被化为一个非线性方程组的求解。最后进行了数值分析, 讨论了碳纳米管的不同参数对动力屈曲的影响, 发现碳纳米管有极强的抗冲击性, 临界屈曲剪应力可高达几百吉帕。

关键词: 固体力学; 动力屈曲; 应力波; 碳纳米管; 分叉

中图分类号: O347.4

国标学科代码: 130 · 1570

文献标志码: A

1 引 言

自从日本学者 S. Iijima^[1] 在石墨电弧放电产物中发现了第一根碳纳米管(CNT)以来, 对 CNT 及其应用有了广泛、深入的研究。CNT 具有优异的物理性能, 为了应用 CNT 构造纳米电子器件、纳米装置和纳米复合材料, 必须了解材料特性对其力学性能的影响, 建立可靠的力学模型。由于可控纳米尺度实验存在困难, 而应用分子动力学模拟大尺度纳米器件既花费昂贵又非常困难, 故连续介质模型被广泛用于研究 CNT 的屈曲、振动和波的传播等问题^[2~5]。B. I. Yakobson 等^[6] 将单壁 CNT 受轴向压缩屈曲的连续介质力学模型模拟结果和分子动力学模型模拟结果进行了比较, 发现由分子动力学模拟所展现的屈曲模态的所有变化都可由连续体模型给出。这个结果与其他许多的研究结果表明^[6~10], 连续介质体模型在 CNT 的研究中仍发挥重要的作用。

碳纳米管承受冲击扭矩作用的动力响应是 CNT 的一个基本的力学行为。虽然前人对 CNT 力学性能进行了许多研究, 但这些工作都仅限于 CNT 弹性静态扭转屈曲问题, 关于 CNT 的动态稳定性问题的研究有限。本文将利用连续介质力学模型将 CNT 模拟成半无限长的弹性连续圆柱壳, 考虑应力波的传播过程, 将冲击扭矩作用下 CNT 的动力屈曲归结为由于扭转应力波的传播导致的分叉问题, 此分叉问题被化为一个非线性方程组的求解。最后进行数值分析, 讨论 CNT 的不同参数对动力屈曲的影响。

2 扭矩作用下的单壁碳纳米管的弹性屈曲

长为 17.1 nm 的单壁碳纳米管(SWNT)用分子动力学模拟的方法计算的临界屈曲应变为 0.064。而将相同条件的 SWNT 模拟成半无限长的连续圆管, 根据 Donnell 弹性壳理论计算的临界屈曲应变为 0.066, 这个结果很好地与分子动力学模拟的结果吻合^[8]。说明将连续体模型应用到 CNT 的研究中是可行的。

现研究 CNT 受冲击扭矩作用的动力屈曲问题, 并将其模拟成一半无限长的连续弹性壳。取图 1 所示的坐标系, 其端部作用一均布突加阶跃剪应力 τ , CNT 右端为铰支边界条件, 设

$$\tau(x, t) = \begin{cases} S & 0 \leq x \leq ct \\ 0 & x > ct \end{cases} \quad (1)$$

* 收稿日期: 2004-12-14; 修回日期: 2005-05-30

基金项目: 国家自然科学基金项目(10172063)

作者简介: 沙风焕(1963—), 女, 副教授, 博士研究生。

在 t 时刻, 设 CNT 横向有一微小扰动 $w(x, y, t)$, 在应力波波及的区域 ($0 \leq x \leq ct$) 内, 动力形式的 Donnell 方程为^[11]

$$\frac{D}{h} \nabla^8 w + \frac{E}{R^2} \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} + 2S \nabla^4 \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x \partial y} \right) + \rho \nabla^4 \left(\frac{\partial^2 w}{\partial t^2} \right) = 0 \quad (2)$$



图1 CNT的力学模型

Fig. 1 Mode of the carbon nanotube

设 w 具有分离变量的形式, 即 $w(x, y, t) = w^*(x, y)T(t)$, $T(t)$ 为横向位移的时间函数, 则有

$$\left[\frac{D}{h} \nabla^8 w^* + \frac{E}{R^2} \frac{\partial^4 w^*}{\partial x^4} + 2S \nabla^4 \left(\frac{\partial^2 w^*}{\partial x \partial y} \right) \right] T(t) = -\rho \ddot{T}(t) \nabla^4 w^* \quad (3)$$

$$\frac{\frac{D}{h} \nabla^8 w^* + \frac{E}{R^2} \frac{\partial^4 w^*}{\partial x^4} + 2S \nabla^4 \left(\frac{\partial^2 w^*}{\partial x \partial y} \right)}{\rho \nabla^4 w^*} = -\frac{\ddot{T}(t)}{T(t)} = \lambda \quad (4)$$

令 $\lambda = \omega^2$, 则有

$$\ddot{T}(t) + \omega^2 T(t) = 0 \quad (5)$$

故动力形式的 Donnell 方程通解形式为

$$w(x, y, t) = w^*(x, y) \sin \omega t \quad (6)$$

由此不难发现, 当 $\omega \neq 0$ 时, 它表征一自由振动而并不是屈曲, 当 $\omega = 0$ 时, 而 $w^*(x, y) \neq 0$ 所对应的载荷参量 S 为一临界值 S_{cr} , 即此时意味着自由振动的周期变成了无穷大而分叉, 故对应的分叉条件是 $\omega = 0$. 在微小扰动的情况下, CNT 壳体的前屈曲运动是一个自由振动, 分叉实际上是不能维持在壳体平衡位置附近的微小自由振动而变成发散型运动的过程. 将分叉条件和(4)式比较, 有

$$\frac{D}{h} \nabla^8 w^* + \frac{E}{R^2} \frac{\partial^4 w^*}{\partial x^4} + 2S \nabla^4 \left(\frac{\partial^2 w^*}{\partial x \partial y} \right) = 0 \quad (7)$$

不难发现, 这是静力形式的 Donnell 方程, 即可以通过静态 Donnell 方程的特征解来讨论动力分叉问题的临界载荷.

在讨论此类动力方程, 并寻求分叉点问题时, 不计横向惯性项. 当然在进行后分叉分析时, 横向惯性效应是必须考虑的, 因为结构分叉之后的变化过程是一瞬态过程, 且这一过程中横向变形是一主要变形. 在 t 时刻, 设 CNT 横向有一微小扰动 $w(x, y, t)$, 线性 Donnell 方程为

$$\begin{cases} \frac{D}{h} \nabla^8 w + \frac{E}{R^2} \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} + 2S \nabla^4 \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x \partial y} \right) = 0 & 0 \leq x \leq ct \\ \frac{D}{h} \nabla^8 w + \frac{E}{R^2} \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} = 0 & x > ct \end{cases} \quad (8)$$

其边界条件在铰支边界处应有 $w|_{x=0} = 0, \partial^2 w / \partial x^2|_{x=0} = 0$, 在无穷远处横向位移、转角以及内力均为零. (8)式即是 CNT 冲击扭矩作用下动力屈曲问题归结为分叉问题所需的方程. 考虑方程(8)的解何时非零, 即何时存在分叉点, 以及在分叉点上各有关参数的关系. 取位移模式 $w(x, y, t)$ 为^[12]

$$w(x, y, t) = \begin{cases} f \left[1 - \cos \frac{2\pi(x-ct)}{ct} \right] \cos \frac{n(y+\beta x)}{R} & 0 \leq x \leq ct \\ 0 & x > ct \end{cases} \quad (9)$$

式中: n 为周向波数, β 为波纹与 x 轴夹角. w 应满足: (1) 周期条件, $w(x, y, t) = w(x, y + 2\pi R, t)$; (2) 铰接边界位移和力的条件, $w|_{x=0} = 0, \ddot{w}|_{x=0} = 0$; (3) 无穷远处位移条件, $w|_{x=\infty} = 0, \ddot{w}|_{x=\infty} = 0$; (4) 方程在波阵面 $x = ct$ 处的位移连续条件, $w_+ = w_-, \dot{w}_+ = \dot{w}_-$; (5) 方程在波阵面 $x = ct$ 处力的连续条件, $M_{x+} = M_{x-}, M_{y+} = M_{y-}, Q_{x+} = Q_{x-}, Q_{y+} = Q_{y-}$. 其中应用了 $\int_0^{2\pi R} \sin \frac{n(y+\beta x)}{R} dy = \int_0^{2\pi R} \cos \frac{n(y+\beta x)}{R} dy = 0$.

不难证明, (9)式给定的位移模式满足周期条件和所有的位移条件, 至于铰接边界条件和波阵面 x

= ct 处的力的边界条件则在积分意义上得到满足。

现将(9)式改写为如下形式

$$\omega(x, y, t) = f \cos \frac{n(y + \beta x)}{R} - f \cos \frac{2\pi(x - ct)}{ct} \cos \frac{n(y + \beta x)}{R} = \omega_1 + \omega_2 + \omega_3 \quad (10)$$

式中

$$\omega_1 = f \cos \frac{n(y + \beta x)}{R}, \omega_2 = -\frac{f}{2} \left(\cos \frac{nY}{R} \cos \xi X - \sin \frac{nY}{R} \sin \xi X \right), \omega_3 = -\frac{f}{2} \left(\cos \frac{nY}{R} \cos \eta X - \sin \frac{nY}{R} \sin \eta X \right),$$

$$\xi = \frac{n\beta}{R} + \frac{2\pi}{ct}, \eta = \frac{n\beta}{R} - \frac{2\pi}{ct}, X = x - ct, Y = y + \beta ct$$

将(10)式代入(8)式中第一式,则有

$$\begin{aligned} & \left[\frac{D}{h} \left(\frac{n}{R} \right)^8 (\beta^2 + 1)^4 + \frac{E}{R^2} \left(\frac{n\beta}{R} \right)^4 - 2S\beta \left(\frac{n}{R} \right)^6 (\beta^2 + 1)^2 \right] \omega_1 + \\ & \left[\frac{D}{h} \left(\xi^2 + \frac{n^2}{R^2} \right)^4 + \frac{E}{R^2} \xi^4 - 2S \frac{\xi n}{R} \left(\xi^2 + \frac{n^2}{R^2} \right)^2 \right] \omega_2 + \\ & \left[\frac{D}{h} \left(\eta^2 + \frac{n^2}{R^2} \right)^4 + \frac{E}{R^2} \eta^4 - 2S \frac{\eta n}{R} \left(\eta^2 + \frac{n^2}{R^2} \right)^2 \right] \omega_3 = 0 \end{aligned} \quad (11)$$

因 $\omega_1 \neq 0, \omega_2 \neq 0, \omega_3 \neq 0$, 则利用 $\omega_1, \omega_2, \omega_3$ 的系数为零可得非线性方程组

$$\begin{cases} \frac{2S}{E} = \frac{D(\xi^2 R^2 + n^2)^2}{Eh\xi n R^3} + \frac{\xi^3 R^3}{(\xi^2 R^2 + n^2)n} \\ \frac{2S}{E} = \frac{D(\eta^2 R^2 + n^2)^2}{Eh\eta n R^3} \left(\frac{h}{R} \right)^2 + \frac{\eta^3 R^3}{(\eta^2 R^2 + n^2)n} \\ \frac{2S}{E} = \frac{Dn^2(\beta^2 + 1)^2}{Eh\beta R^2} + \frac{\beta^3}{n^2(\beta^2 + 1)^2} \end{cases} \quad (12)$$

这样就将分叉问题转化为关于临界屈曲剪应力 S_{cr} 、周向波数 n 和波纹倾角 β 的非线性方程组的求解问题。

3 数值算例分析

在上述问题中,通常感兴趣的是在分叉点上问题中主要参数 S 和 t 之间的关系,给出临界屈曲时间 t_{cr} ,由非线性方程组(12)知,应有一临界屈曲剪应力 S_{cr} 与之对应,并可求出此时的周向波数 n 和波纹倾角 β 。

根据文献[9]取 SWNT 的物理和几何参数为: $\rho=1.3 \text{ g/cm}^3, h=0.066 \text{ nm}, E=5.5 \text{ TPa}, \mu=0.19,$

表 1 参数表

Table 1 Parameters

| R=5 nm | | | | R=15 nm | | | |
|----------------------|---------------------|-----|--------------------|----------------------|---------------------|-----|--------------------|
| $t_{cr}/\mu\text{s}$ | S_{cr}/GPa | n | β/rad | $t_{cr}/\mu\text{s}$ | S_{cr}/GPa | n | β/rad |
| 10 | 23.5 | 14 | 0.53 | 10 | 15.4 | 41 | 0.52 |
| 20 | 20.7 | 13 | 0.51 | 20 | 6.63 | 22 | 0.55 |
| 30 | 19.2 | 12 | 0.50 | 30 | 5.77 | 19 | 0.53 |
| 40 | 14.6 | 10 | 0.41 | 40 | 5.17 | 19 | 0.54 |
| 50 | 14.3 | 10 | 0.40 | 50 | 5.40 | 18 | 0.48 |
| 60 | 14.6 | 10 | 0.41 | 60 | 4.04 | 15 | 0.40 |
| 70 | 14.0 | 10 | 0.40 | 70 | 4.01 | 15 | 0.40 |
| 80 | 14.0 | 10 | 0.40 | 80 | 4.02 | 15 | 0.40 |
| 90 | 13.9 | 10 | 0.40 | 90 | 4.01 | 15 | 0.40 |
| 100 | 13.8 | 10 | 0.40 | 100 | 4.00 | 15 | 0.40 |

$c=5.0 \text{ nm}/\mu\text{s}$, $D=1.36 \times 10^{-19} \text{ N} \cdot \text{m}$ 。图 2 为临界屈曲剪应力 S_{cr} 和临界屈曲时间 t_{cr} 的关系曲线。表 1 为 $R=5, 15 \text{ nm}$ 时不同的临界屈曲时间 t_{cr} 对应的临界屈曲剪应力 S_{cr} 、周向波数 n 和波纹倾角 β 。由图 2 和表 1 可知, 当 $t_{cr} \rightarrow \infty$ 时, 临界屈曲剪应力 $S_{cr} \rightarrow S_{cr}^*$, 即曲线有一水平渐近线, 此时, 临界屈曲剪应力 S_{cr} 就相当于 CNT 的静态临界屈曲剪应力 S_{cr}^* , 对应半径为 $R=5 \text{ nm}$ 的临界应变为 0.061, 与分子动力学和 Donnell 壳的静力临界屈曲剪应变的结果比较吻合, 说明方程(12)给出的冲击扭转动力屈曲模型适合描述 CNT 的动力特性。图 3 给出 $t_{cr}=30 \mu\text{s}$ 时的临界屈曲剪应力 S_{cr} 随半径 R 的变化, 临界屈曲剪应力 S_{cr} 随半径 R 增大而减小, 半径越小, 临界屈曲剪应力 S_{cr} 越大, CNT 的半径在 1 nm 时, 临界屈曲剪应力 S_{cr} 高达 132 GPa ; 小半径的 CNT 抗扭性能好。

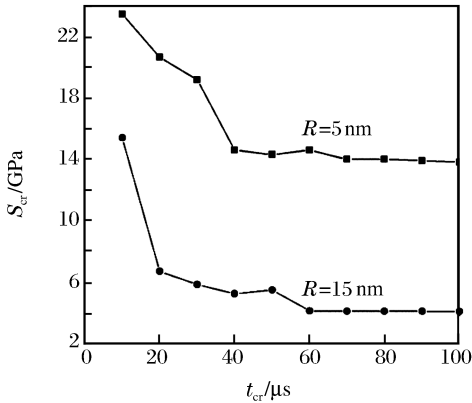


图 2 临界屈曲剪应力与临界屈曲时间的关系

Fig. 2 The critical buckling shearing stress vs the critical buckling time

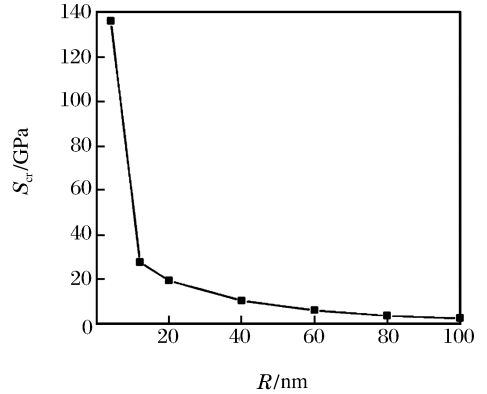


图 3 临界屈曲剪应力与半径的关系

Fig. 3 The critical buckling shearing stress vs the radius

4 结 论

(1) 给出的冲击扭转动力屈曲模型适合描述 CNT 的动力特性, 并将其静力临界屈曲剪应变的值与分子动力学的结果比较, 发现很吻合, 说明连续介质力学可以研究几何尺寸很小的 CNT。

(2) CNT 的临界屈曲剪应力可高达几十甚至几百个吉帕, 而且直径越小, CNT 抗冲击扭转的性能越好。表现出前所未有的抗冲击特性。

(3) 给出的位移模式不仅适用于 CNT 扭转的动力屈曲问题, 而且同样适用于静力屈曲问题。同时, 由于能够精确满足所有的位移边界条件, 因此与其它形式的位移模式相比, 具有精度高, 形式简单的优点。

为了对问题进行简化, 只考虑了半无限长 CNT 壳体中应力波传播导致的分叉问题。问题中不涉及应力波反射的影响。

参考文献:

- [1] Iijima S. Helical microtubes of graphitic carbon[J]. Nature, 1991, 354(7): 56-58.
- [2] Qian D, Gregory J W, Liu W K, et al. Mechanics of carbon nanotubes[J]. Appl Mech Rev, 2002, 55(6): 495-533.
- [3] Treacy M M J, Ebbesen T W, Gibson J M. Exceptionally high Young's modulus observed for individual carbon nanotubes[J]. Nature, 1996, 381(20): 678-680.
- [4] SHA Feng-huan, ZHAO Long-mao, YANG Gui-tong. Investigation of wave propagation in multiwall Carbon Nanotubes[A]. Gutkowski W, Kowalewski T A. XXI international congress of theoretical and applied mechanics [C]. 2004:28.
- [5] 沙风焕, 赵隆茂, 杨桂通. 在受轴向周期扰动作用下双壁碳纳米管动力屈曲的研究[J]. 应用数学和力学, 2005, 26(3): 274-280.

- SHA Feng-huan, ZHAO Long-mao, YANG Gui-tong. Investigation of the dynamic buckling of doublewalled carbon nanotube subjected to axial periodic disturbing forces[J]. Journal of Applied Mathematics and Mechanics, 2005, 26(3): 274–280.
- [6] Yakobson B I, Brabed C J, Bernhoic J. Structural mechanics of carbon nanotubes: from continuum elasticity to atomistic fracture[J]. Phys Rev Lett, 1996, 76(2): 511–512.
- [7] Poncharal P, Wang Z L, Ugarte D. Electrostatic deflections and electromechanical resonances of carbon nanotubes [J]. Science, 1996, 283: 1513–1516.
- [8] Sears A, Batra R C. Macroscopic properties of carbon nanotubes from molecular-mechanics simulation[J]. Journal of Physical Review B, 2004, 69:1–10.
- [9] Ru C Q. Effective bending stiffness of carbon nanotubes[J]. Phys Rew, 2000, 62(15): 9973–9976.
- [10] HAN Qiang, LU Guo-xing. Torsional buckling of a double-walled carbon nanotube embedded in an elastic medium [J]. European Journal of Mechanics A/Solids, 2003, 22: 875–883.
- [11] Donnell L H. Beams, Plates, and Shells[M]. New York: McGraw-Hill, 1976.
- [12] Chiba M, Yamashida T. Dynamic stability of liquid-filled cylindrical shells under periodic sheering forcercs[J]. J Press Vess Tech ASME, 1989, 111: 420–427.

Dynamic buckling in the carbon nanotube under impact torque

SHA Feng-huan^{*}, ZHAO Long-mao, YANG Gui-tong

(Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, Shanxi, China)

Abstract: The dynamic buckling in single-wall carbon nanotubes subjected to impact torque loading has been investigated with a continuum model. A single-wall carbon nanotube can be modeled as an elastic cylindrical shell of semi-infinite length. The dynamic buckling under impact torque is reduced to a bifurcation problem caused by the torsion stress wave propagation. The bifurcation problem can be converted to the solutions for a set of nonlinear equations. The numerical computation has been carried out, and the effects of various parameters on the dynamic buckling are discussed. It is found that a single-wall carbon nanotube has powerful resistance to impact torque, the critical shearing stress for dynamic buckling may reach up to a few hundred GPa.

Key words: solid mechanics; dynamic buckling; stress wave; carbon nanotube; bifurcation

* Corresponding author: SHA Feng-huan
E-mail address: shafenghuan@sohu.com
Telephone: 0351-3521535