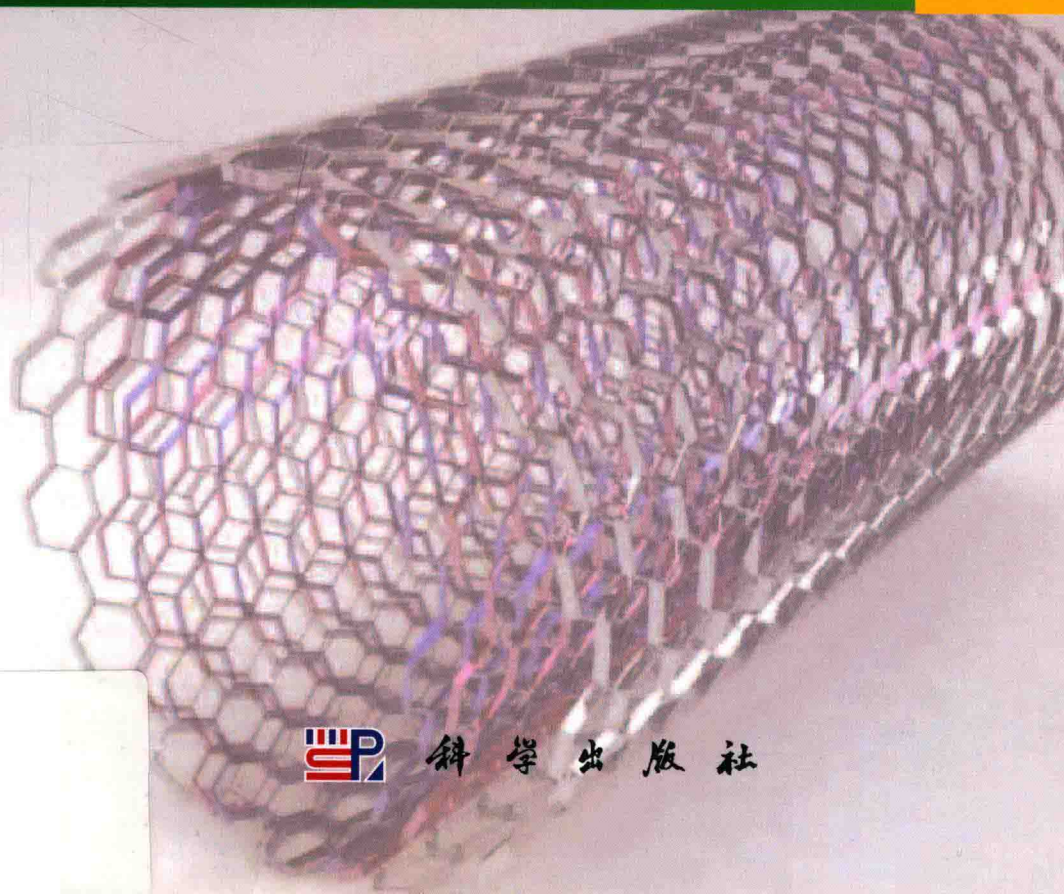


STUDY ON THE DYNAMIC
CHARACTERISTICS OF MULTI
WALLED CARBON NANOTUBES

输流多壁碳纳米管的 动力学特性研究

闫妍 王文全 著



科学出版社

输流多壁碳纳米管的动力学 特性研究

闫 妍 王文全 著

科学出版社

北 京

内 容 简 介

本书总结了碳纳米管力学的研究方法、研究现状与发展趋势,探讨了基于连续介质力学模型的碳纳米管的动力学问题。全书共7章,内容包括:从定性与定量两个角度分别研究碳纳米管的大挠度非线性振动行为;基于Eringen的非局部弹性理论本构关系推导非局部连续介质力学模型的振动方程,考查范德华力对小尺度效应的影响;研究贮(输)流多壁碳纳米管的非线性动力学行为;基于非局部各向异性弹性壳模型研究任意手性单壁碳纳米管在水中的轴对称振动;采用多重弹性壳模型研究内、外润湿性对单壁碳纳米管的动力学行为的影响。

本书适合于纳米科技领域的专业人员、研究生以及具有一定力学基础的研究人员阅读。

图书在版编目(CIP)数据

输流多壁碳纳米管的动力学特性研究/闫妍,王文全著. —北京:科学出版社, 2016.9

ISBN 978-7-03-049885-4

I. ①输… II. ①闫… ②王… III. ①碳—纳米材料—动力特征—研究
IV. ①TB383

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2016) 第 218017 号

责任编辑:赵敬伟 赵彦超/责任校对:彭 涛

责任印制:张 伟/封面设计:耕者工作室

科 学 出 版 社 出 版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

北京京华虎彩印刷有限公司印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2016年9月第 一 版 开本:720×1000 B5

2017年1月第二次印刷 印张:12 插页:2

字数:230 000

定价:78.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换)

前 言

在过去的十几年里,以碳纳米管 (Carbon nanotubes, CNTs) 为基础的微/纳装置受到人们广泛的关注,尤其在微/纳机电领域。CNTs 的纳米尺度和优异的结构特性使其成为结构紧凑、灵敏度高、耗能低、操作安全、适用于现场检测和远程监控的传感器和控制器,例如碳纳米管可以用作电容器电极、开关、质量传感器和纳米谐振器等。同时,由于其耐强酸、强碱,在空气中 973K 以下基本不被氧化的优良性质,碳纳米管被认为是一种理想的贮流、输流、传质和传热元件。例如,碳纳米管可以封装、传输流体和生物类分子,从而广泛地应用于纳米温度计、药物传输装置和生物分子输运等领域。

然而研究人员发现,流体在纳米通道内的流动特征与宏观力学体系存在很大的区别,以原子势为基础的输流 CNTs 系统的力学行为和纳米流体技术的发展相对于单纯 CNTs 固体力学特性的研究滞后很多,尤其是微/纳构件机械振动和流体流动之间的非线性耦合,人们对此耦合机理了解甚少。因而,应用非线性动力学方法和修正连续介质力学方法,在小尺度效应下,对微/纳机电系统中重要的贮流、输流、传质和传热的微/纳管道的多场耦合力学行为、系统动力学特征以及稳定控制策略开展深入研究,对促进微/纳米流体力学和微/纳机电技术的发展具有重要的理论价值和工程应用价值,研究成果可以支撑微/纳输流系统装置的优化设计和技术创新。

在过去的 8 年中,作者较为广泛地开展了流体-结构相互作用、流动数值模拟、CNTs 力学特性、CNTs 振动及稳定性等方面的理论研究,具有一定的知识积累,并在此基础上对相关领域的研究成果进行总结,撰写成此书,供感兴趣的读者参考。

全书共 7 章,在内容安排上力求反映相关领域的最新成果和研究的发展动向。第 1 章介绍了碳纳米管力学的研究方法、研究现状与发展趋势,以及基于连续介质力学模型的碳纳米管的动力学问题。第 2 章介绍了修正连续介质力学模型及动力系统相关理论。第 3 章基于连续介质力学模型从定性与定量两个角度分别研究了碳纳米管的大挠度非线性振动特性。第 4 章基于 Eringen 的非局部弹性理论本构关系推导非局部连续介质力学模型的振动方程,考查范德华力对小尺度效应的影响。第 5 章主要研究了贮(输)流多壁碳纳米管的动力学特性。第 6 章基于非局部各向异性弹性壳模型研究了任意手性单壁碳纳米管在水中的轴对称振动。第 7 章采用多重弹性壳模型研究了表面润湿性对单壁碳纳米管的动力学行为的影响。

在本书完稿之际，作者要衷心感谢昆明理工大学李继彬教授和张立翔教授，是他们指导作者走进此研究领域，其为师为学，使作者终身受益，感恩至深。感谢香港城市大学建筑系 Liew K M 教授和何小桥博士在作者访学期间给予的辛勤指导和无私帮助；感谢研究生刘恒、牛朝、丁云在本书成书过程中给予的帮助和支持；最后还要感谢国家自然科学基金 (10902044、11172115)，高校博士点新教师基金 (20095314120011)、云南省自然科学基金 (2008A037M)、云南省中青年学术和技术带头人后备人才基金 (2015HB017)、昆明理工大学首批学科方向团队“输流微纳管道力学”项目给予的经费资助。另外，本书引用了大量的文献，在此对所引用文献的作者表示感谢。

由于作者水平有限，书中难免存在错误和疏漏之处，诚恳欢迎读者提出宝贵意见，以期共同提高。

作 者

2016 年 2 月

于昆明理工大学

目 录

第 1 章 绪论	1
1.1 引言	1
1.2 碳纳米管的结构与性质	1
1.3 碳纳米管的应用	4
1.4 碳纳米管的力学研究方法	4
1.4.1 实验法	5
1.4.2 分子动力学方法	5
1.4.3 连续介质力学方法	6
1.5 基于连续介质力学模型的碳纳米管的动力学问题	8
1.6 本书的主要内容	9
参考文献	11
第 2 章 修正连续介质力学模型及动力系统相关理论	19
2.1 引言	19
2.2 欧拉梁模型	20
2.2.1 单层欧拉梁模型	20
2.2.2 多层欧拉梁模型	21
2.3 铁摩辛柯梁模型	24
2.4 弹性壳模型	25
2.5 范德华力模型	28
2.5.1 Ru 的范德华力模型	29
2.5.2 He 的范德华力模型	30
2.5.3 Xu 的范德华力模型	32
2.6 动力系统的相关理论	33
2.6.1 二阶动力系统的平衡点	33
2.6.2 平面自治系统的分岔	36
2.7 流固耦合系统的分岔	36
参考文献	38
第 3 章 碳纳米管的非线性动力学行为研究	41
3.1 引言	41
3.2 轴向应力对单壁碳纳米管非线性动力学特性的影响	42

3.2.1	单壁碳纳米管的模型	42
3.2.2	算例	44
3.2.3	本节小结	48
3.3	基于弹性壳模型的简支双壁碳纳米管的非线性动力学行为研究	48
3.3.1	双壁碳纳米管的壳模型	48
3.3.2	算例	53
3.3.3	本节小结	58
3.4	采用多尺度法研究双壁碳纳米管的非线性振动	58
3.4.1	控制方程	58
3.4.2	结果和讨论	65
3.4.3	小结	70
	参考文献	70
第 4 章	小尺度效应对多壁碳纳米管动力学行为的影响	73
4.1	引言	73
4.2	Eringen 的非局部弹性本构关系	74
4.3	基于非局部弹性理论的多壁碳纳米管的欧拉梁模型	75
4.3.1	非局部欧拉梁模型	75
4.3.2	多壁碳纳米管的非局部欧拉梁模型	76
4.3.3	算例	78
4.4	基于非局部弹性理论的多壁碳纳米管的铁摩辛柯梁模型	82
4.4.1	非局部铁摩辛柯梁模型	82
4.4.2	多壁碳纳米管的非局部铁摩辛柯梁模型	83
4.4.3	算例	84
4.5	基于非局部梁模型的相关结论	86
4.6	小尺度效应对温度场中的三壁碳纳米管的轴向屈曲行为的影响	87
4.6.1	三壁碳纳米管的非局部弹性壳模型	88
4.6.2	算例	92
4.6.3	小结	95
	参考文献	95
第 5 章	贮(输)流多壁碳纳米管的动力学特性研究	99
5.1	引言	99
5.2	贮流多壁碳纳米管的非共轴振动	100
5.2.1	贮流多壁碳纳米管的耦合模型	100
5.2.2	流体与碳纳米管的耦合模型	101
5.2.3	算例	103

5.2.4 小结	106
5.3 基于弹性梁模型的输流多壁碳纳米管的动力学行为研究	106
5.3.1 输流多壁碳纳米管的振动模型	106
5.3.2 算例	113
5.3.3 输流双壁碳纳米管和三壁碳纳米管动力学行为的比较	120
5.3.4 小结	125
5.4 基于弹性壳模型的输流多壁碳纳米管的动力学行为研究	125
5.4.1 输流双壁碳纳米管的振动模型	126
5.4.2 流体模型	127
5.4.3 流固耦合模型的振动分析	128
5.4.4 算例	131
5.4.5 小结	137
5.5 基于水壳模型的输流碳纳米管动力学行为研究	138
5.5.1 双层壳体-势流模型	138
5.5.2 结果与讨论	142
5.5.3 小结	146
参考文献	146
第 6 章 任意手性单壁碳纳米管在水中的轴对称振动	150
6.1 引言	150
6.2 各向异性弹性常数与分子力学模型	151
6.2.1 “棒-螺旋”模型	151
6.2.2 应变能的表面密度	152
6.2.3 表面弹性常数	155
6.2.4 非局部各向异性弹性壳模型	156
6.3 碳纳米管的轴对称振动	159
6.4 结果和讨论	163
6.5 小结	168
参考文献	168
第 7 章 表面润湿性对单壁碳纳米管动力学行为的影响	171
7.1 多重壳模型	171
7.2 结果与讨论	174
7.2.1 静水作用下单壁碳纳米管的动力学行为研究	174
7.2.2 流水作用下单壁碳纳米管的动力学行为研究	177
7.3 结论	181
参考文献	181

第1章 绪 论

1.1 引 言

纳米 (nm) 是长度单位, 1 纳米等于十亿分之一米, 即 $1\text{nm} = 10^{-9}\text{m}$ 。1nm 约等于 4~5 个原子排列起来的长度, 20nm 相当于一根头发丝的 1/3000。纳米科技是在纳米尺度内, 通过物质反应、传输和转变的控制来实现创造新的材料、器件和充分利用它们的特殊性能, 探索在纳米尺度内物质运动的新现象和新规律^[1], 是基于纳米尺度的物理、力学、化学、生物学、材料、制造、信息、环境、能源等多学科构成的一个新兴学科交叉体系。纳米科技的提出可以追溯到 1959 年, 著名物理学家、诺贝尔奖获得者 Feynman 曾预言: “当我们得以对细微尺度上的事物加以操纵的话, 将大大扩充我们可能获得物性的范围。” 纳米科技被认为是 21 世纪头等重要的科学技术, 它将改变几乎每一种人造物体的特性, 它的发展将推动与人们生产生活密切相关的各个领域的技术创新。

纳米科技发展中, 纳米材料是它的前导。纳米材料一般指 $0.1 \sim 100\text{nm}$ ^[2,3] (另一说为 $1 \sim 100\text{nm}$ ^[1,4,5]) 的超细微粒组成的材料, 因为纳米材料集中体现了小尺寸、复杂构型、高集成度和强相互作用以及高表面积比等现代科学技术发展的特点, 可能会产生全新的物理、化学现象^[6]。纳米材料中包括了若干个原子、分子, 使得人们可以在原子层面上进行材料和器件的设计与制备。也就是说, 纳米材料一方面可以被当作一种超分子, 充分地展现出量子效应; 而另一方面它也可以被当作一种非常小的宏观物质, 以至于表现出前所未有的特性。“纳米力学着力于探讨由成千上万原子组成的凝聚态物质所涌现的带有整体特征的力学行为^[7]。” 其中碳纳米管 (CNTs) 作为纳米材料中非常重要的成员, 它所引发的碳纳米管力学已在国际上形成了研究热点^[8]。

1.2 碳纳米管的结构与性质

自从日本学者 Iijima^[9] 在 1991 年发现第一根碳纳米管以来, 对碳纳米管的研究引起了人们的广泛关注^[10-63], 内容涉及碳纳米管的合成、电化学性能、光学性能、热学性能、力学性能、振动特性、氧化稳定性及反应动力学、生长动力学特性、稳定性、高温热稳定、管中电渗流分子动力学等不同方面。特别是近几年, 碳纳米管作为纳米材料中的一颗新星, 它的研究进展取得了一些可喜的成果。例如, 碳纳

米管增强复合材料^[64-68], 能够称量 10^{-9}g 物体的纳米秤^[69], 频率可达 GHz 的纳米机械振荡器^[70]、纳米随机存储器^[71]、纳米镊子^[72]、纳米作动器^[73]、纳米温度计^[74]、场发射器^[75]、能源存储器^[10]、扫描隧道显微镜的探针^[76-83] 等。碳纳米管的出现不过十几年, 却引起了世人的关注, 主要在于其纳米尺寸和独特的成键结构, 碳纳米管重量轻, 六边形结构连接完美使得其在电学、化学、力学等方面具有许多优异的性能。

碳纳米管, 又称巴基管, 是碳异构体家族中的一个新成员。它的直径为零点几纳米至几十纳米, 长度一般为几十纳米至微米级甚至厘米量级, 它被看成是由单层或多层石墨片卷曲而成的无缝管状壳层结构, 相邻层间距与石墨的层间距相当, 约为 0.34nm ^[84], 双壁碳纳米管具有独特的结构, 其内外层间距并非固定为 0.34nm , 而是根据内外层单壁碳纳米管的手性不同, 可以在 0.33nm 至 0.42nm 之间变化, 通常可以达到 0.38nm 以上, 与最小直径的单壁碳纳米管 0.4nm 相近。较小直径的双壁碳纳米管由于具有较大的内外层间距, 内外管之间存在相互作用而使得碳纳米管的能带结构发生变化。由此可以预期, 双壁碳纳米管与单壁碳纳米管相比, 可能具有一些特殊的性能。根据构成管壁碳原子的层数不同可将其分为单壁碳纳米管 (SWCNTs)(如图 1.1) 和多壁碳纳米管 (MWCNTs)(如图 1.2)。其中单壁碳纳米管存在三种类型的结构, 分别称为扶手椅型碳纳米管、锯齿型碳纳米管和手性碳纳米管^[85], 如图 1.3 所示。这些类型的碳纳米管的形成, 取决于碳原子的六角点阵二维石墨片“卷曲”形成圆筒形的方式。如图 1.4 所示^[9], 石墨烯片层中的手性矢量为 $\vec{C}_h = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2$, 其中, $\vec{a}_1$ 和 $\vec{a}_2$ 为单位矢量, m 和 n 为整数, 手性角 θ 为手性矢量与 $\vec{a}_1$ 之间的夹角。在此图中 $m = 2, n = 4$ 。为了形成碳纳米管, 可以想象, 这个单胞 $OAB'B$ 被卷起来, 使 O 与 A, B 与 B' 相重合, 端部用二分之一富勒烯封顶, 从而可形成石墨片卷曲形成碳纳米管, 手性矢量的端部彼此相重, 手性矢量形成了纳米管圆形横截面的圆周, 不同的 m 和 n 值导致不同的纳米管结构。当 $m = n, \theta = 30^\circ$ 时, 形成扶手椅型碳纳米管。当 m 或者 n 为 0, $\theta = 0^\circ$, 形成锯齿型碳纳米管。 θ 处于 0° 至 30° 之间, 则形成手性

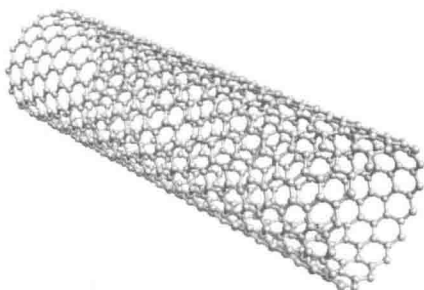


图 1.1 单壁碳纳米管的结构示意图

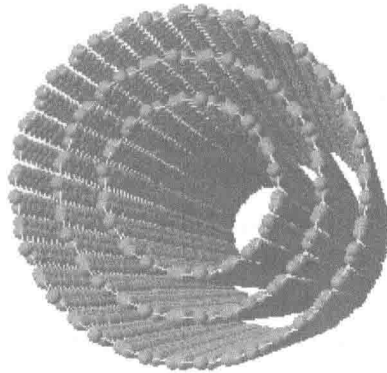


图 1.2 多壁碳纳米管的结构示意图

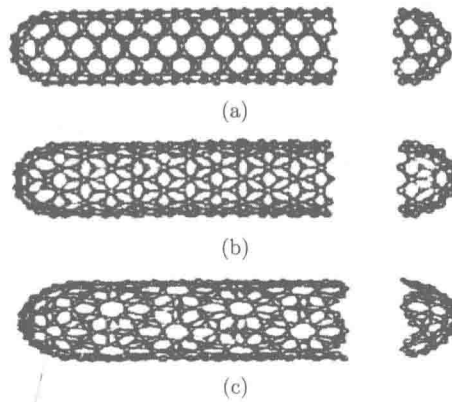


图 1.3 单壁碳纳米管的分类

(a) 扶手椅型碳纳米管; (b) 锯齿型碳纳米管; (c) 手性碳纳米管

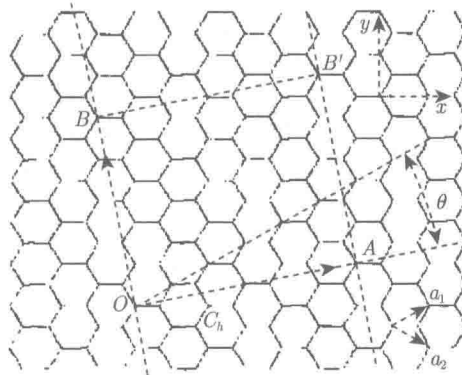


图 1.4 由石墨烯片层构造碳纳米管的示意图

碳纳米管。根据简单的几何关系,可以给出碳纳米管的直径 d 和螺旋角 θ 分别为

$$d=0.783\sqrt{n^2+nm+m^2}, \theta=\arcsin\left[\frac{\sqrt{3}m}{2(n^2+nm+m^2)}\right]。多壁碳纳米管由许多碳管同$$

轴套构而成,不同管间有范德华力相互耦合,层数一般在 2 至 50 层之间不等。

碳纳米管具有奇特的机械力学特性,其杨氏模量与金刚石相近,理论上可达 1.0TPa,强度是钢的 100 倍,但密度仅为钢的 1/6;弯曲强度 14.2GPa;韧性高,可弯曲或相互缠结甚至绕成极小的圆环而不会断裂;耐强酸、强碱,在空气中 973K 以下基本不氧化等。因此碳纳米管被认为是一种终极的增强纤维和理想的纳米流道元件,在有望成为先进复合材料的理想增强体的同时,也有望成为纳米输送系统、纳米机械系统的理想贮流、输流、传质传热元件。

1.3 碳纳米管的应用

碳纳米管可用于多种高科技领域,世界各国都在应用方面投入了大量的研究开发力量,期望能占领该技术领域的制高点。例如,用它做增强剂和导电剂可制造性能优良的汽车防护件;用它做催化剂载体可显著提高催化剂的活性和选择性;碳纳米管较强的微波吸收性能,使它可作为吸收剂制备隐形材料、电磁屏蔽材料或暗室吸波材料等;碳纳米管可以承受强冲击,所以它是很好的装甲和防弹衣的材料;碳纳米管的纳米尺度、高强度和高韧性特征,使得它可以广泛应用于微米甚至纳米机械;碳纳米管有极好的硬度和强度,其复合材料可能具有超越任何现有材料的强度/质量比,使得它可以发展重量起主导作用的航天用材料;碳纳米管有望在场发射平版显示器、化学传感、药物输送和纳米电子领域中有广阔的应用天地,可制成极好的微细探针和导线、性能颇佳的加强材料;它使壁挂电视进一步成为可能,不但可以使屏幕成像更清晰,而且可以缩短电子到屏幕之间的距离,从而制成更薄的电视机,将来并在可能替代硅芯片的纳米芯片和纳米电子学中扮演极重要的角色,从而引发计算机行业革命;碳纳米管可以在较低的气压下存储大量的氢元素,利用这种方法制成的燃料不但安全性能高,而且是一种清洁能源,在汽车工业将会有广阔的发展前景;由于碳纳米管壁能被某些化学反应所“溶解”,因而它们可以作为易于处理的模具;用金属灌满碳纳米管,然后把碳层腐蚀掉,还可以得到导电性能非常好的纳米尺度的导线。此外,利用碳纳米管作为锂离子电池的正极和负极可以延长电池寿命,改善电池的充放电性能。

1.4 碳纳米管的力学研究方法

对于碳纳米管的力学研究,目前采用的方法主要有实验法、分子动力学方法和

连续介质力学方法。根据该领域目前的发展水平,实验法对实验条件要求高,难度大,使用范围有限;而完全采用分子动力学模拟的方法,理论上还不成熟,且计算能力有限,对稍大一点规模的原子系统就难以应付。因此,拓展传统连续介质力学成熟的理论和方法来研究碳纳米管的力学性能引起了人们广泛的注意,许多研究者正努力修正传统连续介质力学的理论用于碳纳米管力学问题的研究,以弥补实验法和分子动力学理论的不足,形成了三种理论和方法并举的研究局面。

1.4.1 实验法

自从 1982 年第一台扫描隧道显微镜的诞生和 1986 年原子力显微镜的出现,显微镜把人们带入微观世界,成为揭示原子、分子世界的观察手段,极大推动了纳米尺度下材料的测试技术,同时也为在纳米尺度下的力学实验提供了一个有利的武器。但由于碳纳米管本身的小尺度和易曲折等特点使得直接用实验方法测量其力学性能比较困难。目前的实验一般仅限于碳管杨氏模量的测定^[64,86-88]和一些大尺寸碳管简单的拉伸和弯曲^[67,89-90]力学性能测试。

1.4.2 分子动力学方法

分子动力学方法通过分子力场来描述原子之间的相互作用,最初主要是化学家们用来分析有机大分子的动力学行为的工具。最近人们开始将分子动力学方法有效地用于模拟碳纳米管的弹性性能和力学行为。该方法将系统势能划分为若干独立部分,分别用来表征原子间的各种相互作用,因此该法可以充分考虑分子离散结构对其力学性能和行为的影响。对于一些特定问题,利用分子动力学方法可获得问题的显式解,已经有许多学者利用分子动力学模型对碳纳米管的某些力学性能进行研究。例如, Yakobson 等^[91]采用 Brenner 势的分子动力学,模拟了单壁碳纳米管在轴向压力作用下的屈曲模型,给出了加载过程中出现的四个失稳的突变形态,如图 1.5 所示。Yakobson 还给出了弯曲和扭转荷载作用下的屈曲,在弯曲情况下,屈曲模态表现为管的中部区域的坍塌,这与 Iijima 等^[92]和 Wong 等^[93]的试验观察相符。Hertel 等^[94]也用类似的方法研究了多壁碳纳米管大变形弯曲甚至屈曲。通过上述例子表明分子动力学模型在碳纳米管的性能研究中起着不可低估的作用,但分子动力学模拟也有其固有的缺点。当研究对象的原子数或分子数很大时,分子动力学模拟计算量非常大,对计算机处理能力的要求很高。例如, Liew 等^[95]使用计算机并行系统 SGI Origin 2000 对含有 2000 个原子卷曲矢量为 (10, 10) 的单壁碳纳米管的屈曲失稳进行了分子动力学模拟,计算长达 36 小时。Liew 等^[96]还对受扭转,长细比为 9.1,含有 15097 个原子,卷曲矢量分别为 (5, 5), (10, 10), (15, 15) 和 (20, 20) 的四层碳管嵌套的碳纳米管做了弹塑性变形和断裂分析。超型计算机 SGI Origin 3000 系统耗时 2 个多月。事实上,分子力学模型,通常仅用于原子数目

相对较少的系统, 比如, 单壁或者壁数较少的多壁碳纳米管。文献中极少见分子动力学模型用于壁数较多的多壁碳纳米管。因此, 针对碳纳米管的力学行为, 科学家们正在不断探寻着更为有效的研究分析方法。

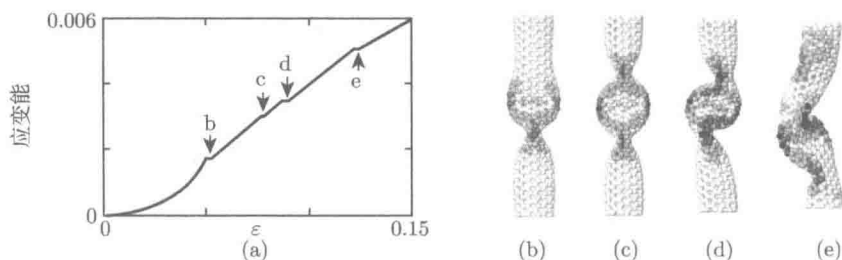


图 1.5 受压的单壁碳纳米管的变形特征与相应的应变能大小

1.4.3 连续介质力学方法

随着研究的深入, 人们发现连续介质力学模型能够有效地预测单壁和多壁碳纳米管的力学行为。对于大长径比的碳纳米管通常可应用弹性梁模型, 而对于小长径比或者变形复杂的碳纳米管可应用弹性壳模型模拟。由于碳纳米管的中空多壁结构和范德华力的存在已对传统的弹性模型产生了挑战, 许多研究者正努力修正传统连续介质力学的理论用于碳纳米管力学问题的研究, 以弥补实验法和分子动力学理论上的不足。例如, Ru^[97,98] 和 He 等^[99] 分别提出了考虑范德华力作用的连续介质力学模型讨论碳纳米管的力学问题。

Yakobson 等^[91] 针对单壁碳纳米管轴向受压状态下的屈曲问题, 对比了原子模型和弹性壳模型的结果后指出: “连续介质力学的定律令人惊奇的有效, 它甚至允许人们研究内在不连续的, 只有几个原子直径大小的物体^[100]。” Wang 等^[101] 应用弹性壳模型研究多壁碳纳米管轴向受压状态下的屈曲问题, 结果表明壳模型与实验结果很一致。对径向受高压作用的一组 20 壁碳纳米管屈曲问题 (最内管半径为 1.5nm, 最外管半径为 8nm), 弹性壳模型预言的临界压强为 1GPa, 与实验测得的结果 1.5GPa 大致吻合^[102]。弹性壳模型对碳纳米管的有效性通过与分子动力学模拟结果的比较也得到了令人信服的证实, 对半径为 0.5nm 的单壁碳纳米管的轴压屈曲, 弹性壳模型预言的临界轴向应变为 0.075, 与分子动力学模拟结果 0.05^[91] 或者 0.08^[103] 吻合的很好, 对半径分别为 1.1nm, 1.65nm 的单壁碳纳米管的轴压屈曲, 弹性壳模型预言得临界轴向应变分别为 0.034, 0.023, 与分子动力学^[104] 模拟结果 0.037, 0.025 吻合得很好。这些比较结果表明可以用弹性壳模型来研究单壁和多壁碳纳米管的力学问题。需要指出的是, 在使用薄壳模型分析碳纳米管的力学行为时, 碳纳米管管壁的厚度是一个有争议的问题。很多研究者将碳纳米管相邻两层

的层间距定义为碳管名义厚度 h (约 0.34nm), 此时弹性模量 E 大约为 1 TPa。如果沿用经典公式, 单壁碳管的弯曲刚度 $D = Eh^3/12$, 这样算出来的结果比实际的弯曲刚度 0.85eV 大了近 25 倍, 产生了矛盾^[92,105]。Yakobson 等^[91] 把碳纳米管的厚度取为 0.066nm, 相应的弹性模量取为 5.5TPa, 保留了经典弯曲刚度与弹性模量和厚度的关系式。Ru^[26,98,106] 在使用连续介质力学模型分析碳纳米管的力学行为时, 采用名义厚度 0.34nm, 放弃了关系 $D = Eh^3/12$, 采用独立于名义厚度 h 的弯曲刚度 D 。无论采取哪种定义, 碳纳米管的弯曲刚度 D 和平面刚度 Eh 都是恒定的, 即不随厚度定义不同而发生变化。此外, 使用欧拉梁和铁摩辛柯梁模型考察多壁碳纳米管的屈曲和振动, 单壁碳纳米管的屈曲荷载、振动频率、振动模态与实验结果吻合^[64,69,83]。Harrik^[107] 对梁假定作了进一步探究。从缩放比例分析入手, 他提出了三个无量纲参数以检验连续性假定的有效性, 并讨论了这些参数和分子动力学模拟之间的关系。Popov 等^[108] 应用弹性梁公式计算碳纳米管的杨氏模量并与其他方法得出的结果进行比较, 吻合得很好。特别地, 多壁碳纳米管的非共轴振动, 这个新现象首先是由多壁弹性梁模型模拟发现^[109], 其主要理论预言已被其他研究者的分子动力学和原子模型结果所证实^[110]。连续介质力学模型得到的一些简单公式能正确和有效地反映碳纳米管基本和重要的力学行为。通常这些简单公式不能通过实验或者分子动力学模型得到。

微纳米结构中表面力的作用由于尺度效应出现了新的现象, 而这些表面力在宏观尺度中通常可被忽略, 但在微纳米尺度中必须加以考虑。范德华力本质上是短程力, 但在涉及大量分子和相对大表面时, 却可产生长达微米量级的长程效应, 在讨论多壁碳纳米管的力学问题时, 范德华力的影响是必须考虑的重要因素。目前主要有三种范德华力模型: Ru^[26] 基于应用弹性壳模型提出范德华力与碳纳米管的变形成正比, 但是他只考虑相邻碳管之间的范德华力, 忽略了不相邻层间范德华力的作用, 也没有考虑半径所产生的影响; He 等^[99] 指出了 Ru 模型的缺点, 提出了考虑半径和不相邻碳管间的范德华力作用的更精确的模型; Xu 等^[111] 基于弹性欧拉梁模型提出了双壁碳纳米管的非线性范德华力模型。

由于纳米尺度的实验受到取材、实验设备、观测手段等条件的限制, 而分子动力学模拟计算量非常大, 对计算机处理能力的要求很高。所以, 利用连续介质力学模型研究碳纳米管的力学行为已成为最有效的方法之一。连续介质力学模型能提供反映碳纳米管基本和重要的力学行为的相对简单的计算公式, 把握住问题的主旨, 引导实验研究和分子动力学模拟进一步发展, 并允许研究者针对碳纳米管更复杂的物理现象提出更新更精确的弹性模型。例如, 由于多壁碳纳米管的管间距很小, 处于不同管上的原子之间存在着不可忽视的作用力, 与发展相对完善的宏观连续介质力学不同, 这里研究多壁碳纳米管的力学行为时必须考虑原子间的范德华力。将宏观连续介质力学和微观原子间的范德华力结合起来研究多壁碳纳米管的

力学行为。研究发现范德华力使多壁碳纳米管中每一层管的变形相互耦合,因而使问题变得复杂。

1.5 基于连续介质力学模型的碳纳米管的动力学问题

自从人们发现连续介质力学模型能够有效地预测单壁和多壁碳纳米管的力学行为,弹性模型已经被广泛应用于研究碳纳米管的振动^[51,64,109-115]及波的传播^[24,41,45,48-50,52,116-121]。

非共轴振动是指多壁碳纳米管的不同层之间产生了相对运动或者说初始同心的不同管道之间产生了相对位移。对较短的多壁碳纳米管,因为高阶模态的特征波长只有其直径的几倍,壁间相对位移不可忽略,从而导致多壁碳纳米管在较高频率的激励下会产生非共轴振动。 N 层碳纳米管有 $N-1$ 个临界频率,只有当振动频率远远低于所有的临界频率时,它的振动才是同轴的,但是只要振动频率高于 $N-1$ 个临界频率中的任意一个时,其振动的非共轴程度就很严重。因为非共轴振动将影响多壁碳纳米管的物理性质,所以非共轴振动研究对多壁碳纳米管具有重要意义^[51,109,111,114,115]。Yoon等^[118]用多层弹性梁模型描述了多壁碳纳米管中声波的传播,发现在高频振动中多壁碳纳米管的径向位移将起着重要的作用,振动基本是非共轴的。将碳纳米管嵌入到聚合物或金属基体中,Yoon等^[114]发现单壁碳纳米管的固有频率变大,多壁碳纳米管的振动变复杂,当弹性体刚性很大时,几乎所有的振动模态都是非共轴的。考察受迫振动和多壁碳纳米管在不同的边界条件下(例如外管固支、所有内管自由的情况下)的振动情况,冯江涛^[122]发现振动随着激励力频率的升高由共轴振动过渡到非共轴振动,并讨论了内外管在不同边界支撑条件下多壁碳纳米管固有频率和自由振动的特性。

Govindjee和Sackman^[123]检验了多壁碳纳米管作为欧拉梁模型时的有效性。他们发现在纳米尺度范围里,材料性质的尺寸依赖特征,而这个特点在经典的连续介质力学中是不出现的。Peddieson等^[124]指出“纳观器件将表现出非局部效应,非局部连续介质力学在与纳米技术应用有关的分析研究中起着重要的作用”。Sudak^[125]建立了多壁弹性梁模型,研究了多壁碳纳米管的柱体弯曲,证明了小尺度效应对多壁碳纳米管影响很大。Wang等^[126]应用非局部弹性理论和铁摩辛柯梁模型考察纳米梁的自由振动。Lu等^[127]和Zhang等^[128]应用非局部欧拉梁模型研究简支双壁碳纳米管的动力学行为。

从整体上看,研究碳纳米管固体力学行为的文献很多,但是关于碳纳米管流动问题的研究则较少,有关流固耦合下碳纳米管的力学行为以及振动稳定性方面的研究报道就更少。根据该领域目前的发展水平,要研究纳米管流动系统及其耦合作用的力学行为和振动稳定性,如前所述,完全采用分子动力学模拟存在很大的

困难。因此,利用连续介质力学的理论和方法来研究碳纳米管的力学性能引起了人们的注意。例如,Shen^[129]考虑高阶剪切变形,应用Karman-Donnell壳模型对静水压作用下双壁碳纳米管的后屈曲做了研究。Wang等^[130]利用弹性梁和势流理论调查了不同参数条件下流固耦合碳纳米管的振动行为,得出了一些有意义的结果。Dong等^[131]使用薄壳模型,报道了嵌入在弹性介质中的充液碳纳米管中波的散射特点。

碳纳米管的应用基于对其力学行为的理解和认识^[91,123,132,133]。例如,实验和分子动力学模拟都表明碳纳米管的力学变形能够导致其电学性质的变化。因此,单壁碳纳米管和多壁碳纳米管的力学性质和力学行为一直受到科技界的极大关注。此外,考察碳纳米管受到外界高压时的各种行为时发现,高压作用下碳纳米管的结构可能发生变化,甚至失稳,这种失稳可能导致碳纳米管物理性质的突变。将非线性动力学方法(如分岔、混沌、突变、分形等)引入纳观研究是一个可望取得突破性成果的前沿研究方向。因为纳观原子运动的力学规律更富有随机性,更能为动力系统的随机/确定性转换理论提供用武之地;这些运动规律的转化可能标志着固体材料的重要力学性能(或其他物理性能)的突变;用宏微观结合的手法可能取得具有应用价值的力学控制方式即通过宏观力学氛围的变化来控制纳观原子运动规律的分岔、突变乃至混沌过程^[134]。Piskin等^[135]对二维晶格上裂纹扩展的动响应进行了分析。Mohan等^[136]在一维原子串模型下研究了裂尖原子串的非线性动力学行为。Tan^[137,138]研究了解理和位错发射过程中的裂尖原子的混沌运动。

1.6 本书的主要内容

如前所述,纳米尺度的动力学问题具有相当的理论意义和应用前景。本书将选择碳纳米管为研究对象,应用连续介质力学方法,研究四个与范德华力(宏观经典力学中被忽略)有关的纳米尺度问题:①研究范德华力引起的碳纳米管幅频特性曲线的突变问题;②研究基于非局部弹性理论的碳纳米管振动特性;③研究充流多壁碳纳米管系统的动力学行为和稳定特性;④外界环境对碳纳米管非线性动力学行为的影响。本书的结构安排如下:

第1章简要介绍了碳纳米管的结构、性质、应用以及碳纳米管力学的研究方法、研究现状与发展趋势,探讨了基于连续介质力学模型的碳纳米管的动力学问题。

第2章介绍了修正连续介质力学模型及动力系统相关理论,评述了碳纳米管的模型和模拟情况,探讨了几个与碳纳米管振动密切相关的问题,例如:非共轴振动,充流碳纳米管的动力学行为,小尺度效应,介绍了三种范德华力模型以及动力系统的平衡点(奇点)和流固耦合系统的分岔类型。