

单壁碳纳米管的等效梁单元有限元模型¹⁾

李海军 郭万林²⁾

(南京航空航天大学航空宇航学院纳米科学研究所, 南京 210016)

摘要 石墨层和单臂碳纳米管都是以 C—C 共价键结合的. 在小变形条件下 C—C 键的势能可用谐和函数来描述, 这与梁单元的变形能具有相同的形式, 因此可以用梁单元等效 C—C 键的作用. 提出了一种 C—C 键的等效梁单元有限元模型, 该模型能够完备地替代谐和势描述 C—C 键的伸长、面内键角变化、离面键角变化和扭转. 通过分析石墨层的典型受载情况得到了等效梁单元的参数, 以及等效梁单元参数与谐和势参数的关系, 并用该模型计算了单臂碳纳米管的杨氏模量和泊松比, 计算结果为相关文献所验证.

关键词 碳纳米管, 有限元, 谐和势, 分子力学, 连续介质力学

中图分类号: O343.2 文献标识码: A 文章编号: 0459-1879(2006)04-0488-08

引 言

作为新兴的纳米材料, 碳纳米管^[1](carbon nanotubes, CNTs) 具有非常优异的力学、电学、热学、磁学和光学性能, 其应用前景非常广阔, 因而引起了广泛的研究兴趣. 碳纳米管的实验研究取得了许多卓越的成就, 但是, 由于碳纳米管的尺度非常小(10^{-9}m 量级), 实验中对其操纵和测量很困难, 代价昂贵且不容易重复. 因此, 随着计算技术的迅猛发展, 碳纳米管的数值模拟方法得到了广泛的关注. 数值模拟方便重复, 代价相对低廉, 并且可以排除复杂的实验环境的影响. 因此, 数值模拟已经成为解释实验现象、总结实验结果以及指导实验方向的重要手段.

近年来分子动力学 (molecular dynamics, MD)^[2] 方法在碳纳米管的数值模拟方面取得了巨大的成功. 但是, 分子动力学方法模拟每个原子的运动, 计算规模大, 在空间和时间尺度上都受到了很大的限制, 这成为目前分子动力学方法的最主要障碍. 于是, 经典的连续介质力学方法很快进入了人们的视野, 连续介质力学方法较少受到时间和空间尺度的限制, 很多问题甚至能够得到解析解, 虽然难于兼顾结构原子尺度细节的影响, 但是仍能够得到大量非常有意义的结论.

碳纳米管的连续介质力学研究取得了大量的进

展. Yakobson 等^[3] 和 Ru^[4] 用弹性壳模型分析了碳纳米管的屈曲问题. Chang 等^[5]、Shen 等^[6] 和 Xiao 等^[7] 用杆-弹簧模型 (stick-spiral model), Zhang 等^[8] 用非中心对称的 Cauchy-Born 准则, Popov 等^[9] 用晶格动力学的方法求得了碳纳米管弹性常数的解析解. Zheng 等^[10] 用能量变分的方法分析了多壁碳纳米管构成的 GHz(10^9Hz) 振荡器. Li 等^[11] 提出了分析碳纳米管的结构力学方法并利用该方法分析了碳纳米管的弹性模量. 为了跨越不同的空间尺度, 一系列多尺度 (multi-scale) 方法也相继被提出, 如 Tadmor 等^[12] 提出的准连续 (quasicontinuum) 方法, Liu 等^[13] 提出的原子尺度有限单元法 (atomic-scale finite element method), Qian 等^[14] 提出的多尺度投影法 (multiscale projection method), 张田忠^[15] 采用郑泉水教授的建议提出的原子/连续介质混合模型等. 连续介质方法能够在一定范围内很好地模拟碳纳米管的各种力学行为, 由其计算得到的结果很多都得到了实验和分子动力学方法的验证, 因而成为研究碳纳米管的重要工具.

本文基于连续介质力学理论, 在 Li 等^[11] 工作的基础上, 用轴对称截面梁单元等效 C—C 键的力学行为, 构建了单壁碳纳米管的有限元模型, 从而使得方便快捷地进行单臂碳纳米管的各种力学问题的计算成为可能. 作为对该模型的验证, 本文计算

2005-07-05 收到第 1 稿, 2005-11-14 收到修改稿.

1) 国家自然科学基金 (10372044, 50275073) 和江苏省科技厅预研基金资助项目.

2) E-mail: wlguo@nuaa.edu.cn

了单臂碳纳米管的杨氏模量和泊松比, 计算结果为相关文献所验证.

1 C—C 键的原子间作用势

单壁碳纳米管的力学性质主要取决于碳原子间的键合作用. 由于单壁碳纳米管可以看成石墨层片沿不同方向卷曲而成 (其取向可以用一对手性矢量 (m, n) 来表示^[11]), 因而可以通过研究石墨层的 C—C 键来研究碳纳米管的 C—C 键^[5,11]. 因此我们先来关注一下石墨层中的 C—C 键.

石墨层中的碳原子是 sp^2 杂化的, 相互结合形成共价键 (σ 键), 位于同一平面上 (σ 平面), 相互间的夹角为 120° , 形成正六边形的网状结构 (图 1). 此外, 在各原子上沿垂直于 σ 平面的方向形成 π 键, σ 键与 π 键决定的平面称为 π 平面. π 键与相邻层碳原子的 π 键通过层间范德华力相互作用^[16].

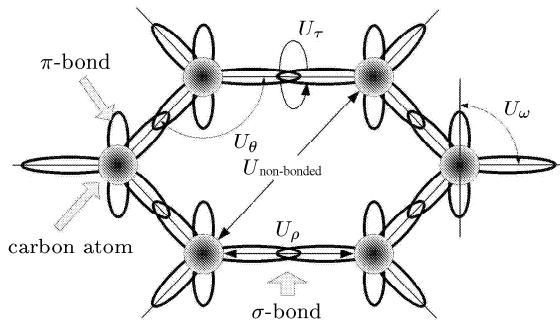


图 1 石墨层的键结构

Fig.1 Bond structure of graphite sheet

根据 Born-Oppenheimer 近似, 忽略电子结构的影响, 采用分子力学的方法可将石墨层 C—C 键系统的总势能 U_{total} 考虑成如下形式^[5,9,11]

$$U_{\text{total}} = U_{\rho} + U_{\theta} + U_{\omega} + U_{\tau} + U_{\text{vdw}} + U_{\text{es}} \quad (1)$$

式中 U_{ρ} 为 σ 键拉伸的能量, U_{θ} 为面内键角 (σ 键与 σ 键的夹角) 变化的能量, U_{ω} 为离面键角 (σ 键与 π 键的夹角) 变化的能量, U_{τ} 为 σ 键扭转的能量, U_{vdw} 和 U_{es} 分别对应于范德华作用和静电作用的能量, 它们是非键合的长程作用 ($U_{\text{non-bonded}}$), 图 1 中画出了以上各能量项的示意图. 对于 C—C 共价键, 式 (1) 中后两项通常可以忽略不计^[5,11], 因此

$$U_{\text{total}} = U_{\rho} + U_{\theta} + U_{\omega} + U_{\tau} \quad (2)$$

对于小变形条件下的力学问题, 用谐和势足以描述 C—C 键的性质, 于是式 (2) 中各能量项可表示

为^[5,11,17]

$$U_{\rho} = \sum_i \frac{1}{2} K_{\rho} (d\rho_i)^2 \quad (3)$$

$$U_{\theta} = \sum_j \frac{1}{2} K_{\theta} (d\theta_j)^2 \quad (4)$$

$$U_{\omega} = \sum_k \frac{1}{2} K_{\omega} (d\omega_k)^2 \quad (5)$$

$$U_{\tau} = \sum_l \frac{1}{2} K_{\tau} (d\varphi_l)^2 \quad (6)$$

式中 $d\rho$ 表示 σ 键的伸长量, $d\theta$, $d\omega$ 和 $d\varphi$ 分别表示为面内键角、离面键角和扭转角的变化量; K_{ρ} , K_{θ} , K_{ω} 和 K_{τ} 分别表示对应于位移量 $d\rho$, $d\theta$, $d\omega$ 和 $d\varphi$ 的力常数; i, j, k, l 为累加指标.

2 C—C 键到梁单元的等效

用谐和函数描述的 C—C 键的势能与梁的变形能具有相同的函数形式, 因此很显然可以用梁单元来等效小变形条件下的 C—C 键. Li 等^[11] 用中心对称截面梁的单轴拉伸、纯弯曲和纯扭转来等效 C—C 键的受力情况. 本文延续这一思想, 但是从物理基础来看, 石墨和碳管层状结构中 C—C 键的面内弯曲刚度和离面弯曲刚度肯定是不同的, 本文首次将面内弯曲和离面弯曲区别对待, 采用轴对称截面梁单元等效 C—C 键, 而非 Li 等^[11] 采用的中心对称截面梁单元. 并且作者通过后文的受力分析发现 C—C 键的键角变化不能用梁单元的纯弯曲来等效, 而应用组合弯曲.

石墨层的原子结构是周期性的, 可以用一个单胞代表整个石墨层 (图 2(a)), 该单胞中 a, b 为键长, α, β 为键角 (图 2(b)), 未受载时 $a = b = 0.142 \text{ nm} \triangleq L$, $\alpha = \beta = 2\pi/3$. 用轴对称截面梁单元描述 C—C 键的作用 (图 2(c)), 在梁单元的局部坐标系 $\bar{x}-\bar{y}-\bar{z}$ 中, $\bar{x}-\bar{y}$ 平面对应于石墨层的 σ 平面, E, G 和 ν 为等效梁单元所对应的材料的弹性模量、扭转模量和泊松比, t_y 和 t_z 为梁单元横截面的边长, A 为横截面的面积, I_y 和 I_z 为横截面绕 $\bar{y}$ 轴和 $\bar{z}$ 轴的惯性矩, J 为横截面的极惯性矩. 有如下关系

$$A = t_y t_z \quad (7)$$

$$I_y = \frac{t_y t_z^3}{12} \quad (8)$$

$$I_z = \frac{t_y^3 t_z}{12} \quad (9)$$

$$J = I_y + I_z \quad (10)$$

$$G = E/2(1 + \nu) \quad (11)$$

以上各参数中只有 4 个参数是独立的, 这 4 个

参数及其与谐和势的关系可以通过分析石墨层的单轴拉伸和纯弯曲得到.

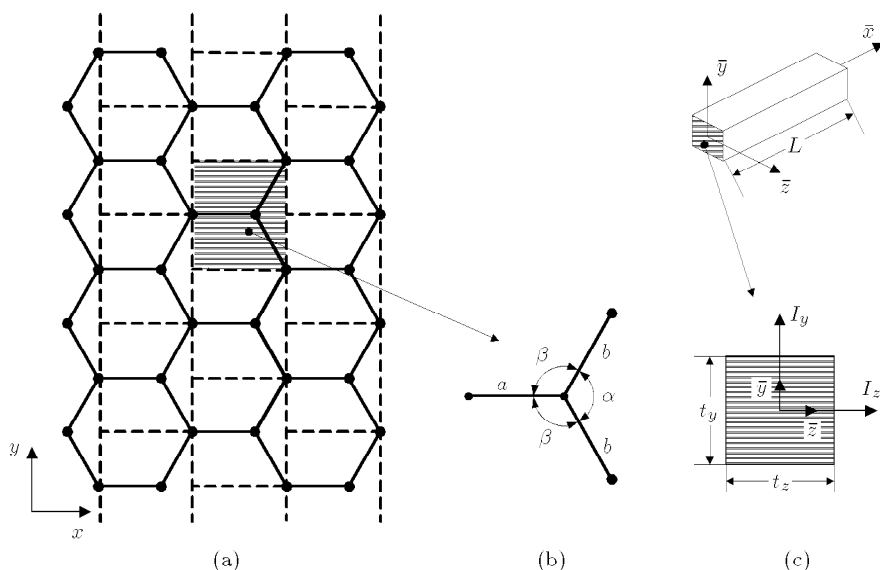


图 2 石墨层单胞及 C—C 键的等效梁单元

Fig.2 Graphite cell and equivalent beam element of carbon-carbon bond

2.1 石墨层的单轴拉伸

对于在 y 方向上受均匀分布的单轴拉伸载荷 f 作用的石墨层 (图 3(a)), 若石墨层的取向仍如图 2(a) 所示, 则其单胞上作用的载荷如图 3(b) 所示, 其中 F, M 为相邻 C—C 键作用在该单胞上的力和力矩, 且

$$F = f \left(a + b \cos \frac{\alpha}{2} \right) = \frac{3}{2} f L \quad (12)$$

由图 3(c) 中受力分析可以看出 C—C 键的键角变化不能用梁单元的纯弯曲来等效, 而应用组合弯曲来

等效. 由 b 键的受力平衡可得

$$M = \frac{1}{4} FL \quad (13)$$

在载荷 F 和 M 作用下, b 键的挠曲线如图 3(d) 所示, 在小变形条件下, 通过梁的弯曲理论可以求得 b 键的伸长量 db 和挠度 v 为

$$db = \frac{\sqrt{3}}{2} F \left(\frac{L}{EA} \right) \quad (14)$$

$$v = \frac{FL^2}{24} \left(\frac{L}{EI_z} \right) \quad (15)$$

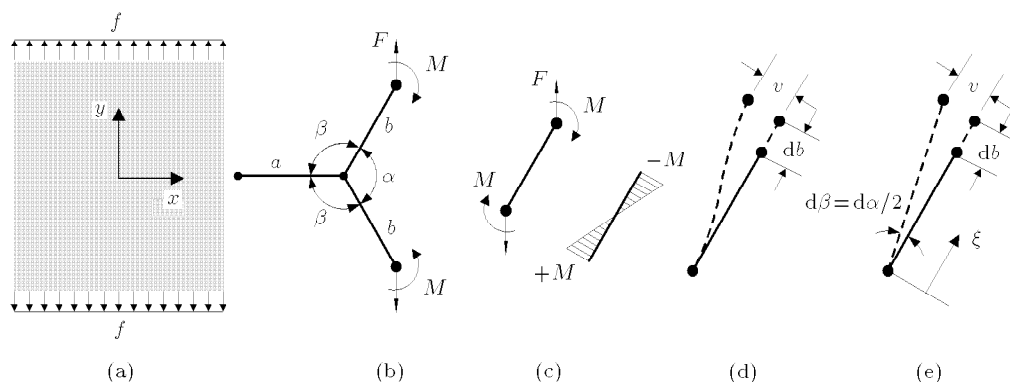


图 3 石墨层的单轴拉伸

Fig.3 Uniaxial tension of graphite sheet

于是该石墨层在 x, y 两方向上的应变 ε_x 和 ε_y 为

$$\varepsilon_x = \frac{db \cos(\alpha/2) - v \sin(\alpha/2)}{a + b \cos(\alpha/2)} = \frac{db - \sqrt{3}v}{3L} \quad (16)$$

$$\varepsilon_y = \frac{db \sin(\alpha/2) + v \cos(\alpha/2)}{b \sin(\alpha/2)} = \frac{\sqrt{3}db + v}{\sqrt{3}L} \quad (17)$$

而该石墨层在 x, y 两方向上的应力 σ_x 和 σ_y 为

$$\sigma_x = 0 \quad (18)$$

$$\sigma_y = \frac{F}{[a + b \cos(\alpha/2)]h} = \frac{2F}{3Lh} \quad (19)$$

其中 $h = 0.34 \text{ nm}$ 为石墨层的厚度. 式 (16)~(19) 满足石墨层的面内本构方程

$$\left. \begin{aligned} \sigma_x &= C_{11}\varepsilon_x + C_{12}\varepsilon_y \\ \sigma_y &= C_{21}\varepsilon_x + C_{22}\varepsilon_y \end{aligned} \right\} \quad (20)$$

其中 $C_{11} = C_{22} = 1060 \text{ nN/nm}^2$, $C_{12} = C_{21} = 180 \text{ nN/nm}^2$ ^[18] 为石墨层的刚度系数. 将式 (16)~(19) 代入式 (20), 联立式 (14),(15) 可得

$$\frac{EA}{L} = 730 \text{ nN/nm} \quad (21)$$

$$\frac{EI_z}{L} = 0.67 \text{ nN} \cdot \text{nm} \quad (22)$$

2.2 石墨层的纯弯曲

图 4(a) 所示石墨层, 上下两边和左右两边分别受均匀分布弯矩 m 和 μm 的作用 (弯矩的方向遵循右手法则, $\mu = C_{12}/C_{11} = 0.17$ 为石墨层的泊松比), 根据薄板弯曲理论, 其本构方程为

$$\left. \begin{aligned} \mu m &= D(\kappa_x + \mu \kappa_y) \\ m &= D(\mu \kappa_x + \kappa_y) \end{aligned} \right\} \quad (23)$$

式中 $D = 0.85 \text{ eV} = 0.136 \text{ nN} \cdot \text{nm}$ 为石墨层的抗弯刚度^[3], κ_x, κ_y 为石墨层沿 x 轴和 y 轴方向的曲率.

由式 (23) 可得

$$\kappa_x = 0 \quad (24)$$

$$\kappa_y = \frac{m}{D} \quad (25)$$

即石墨层为沿 y 方向的纯弯曲. 若该石墨层的取向与图 2(a) 一致, 则石墨层单胞上所受载荷如图 4(b) 所示, 其中

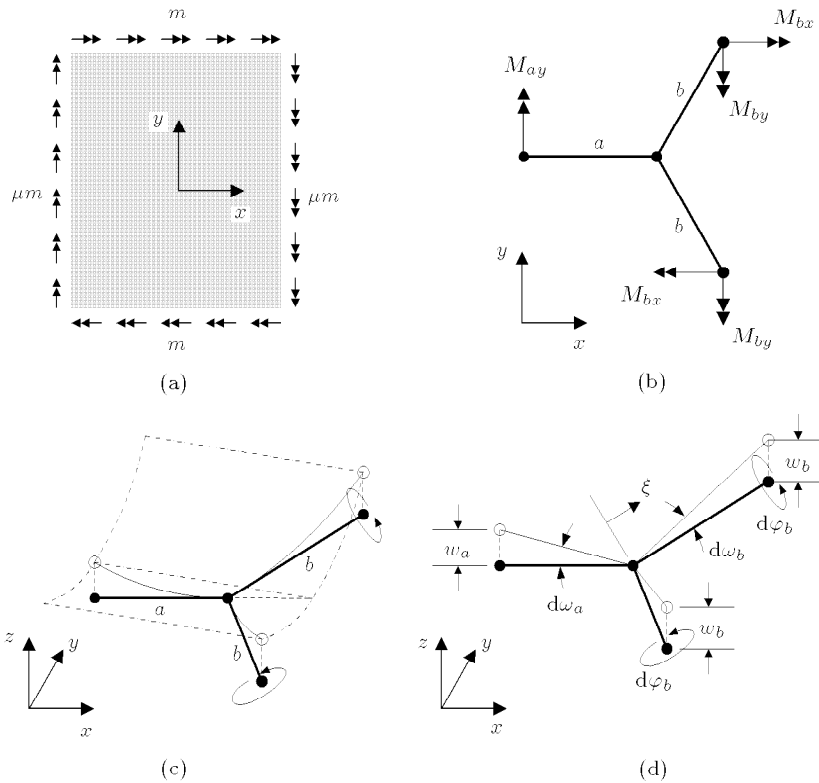


图 4 石墨层的纯弯曲

Fig.4 Pure bending of graphite sheet

$$M_{ay} = \mu m \left(2b \sin \frac{\alpha}{2} \right) = \sqrt{3} \mu m L \quad (26)$$

$$M_{bx} = m \left(a + b \cos \frac{\alpha}{2} \right) = \frac{3}{2} mL \quad (27)$$

$$M_{by} = \frac{1}{2} M_{ay} = \frac{\sqrt{3}}{2} \mu m L \quad (28)$$

以单胞中间 C 原子为参考点, 则各等效梁单元的挠曲线如图 4(c), 图 4(d) 标出了各 C 原子的位移. 则在小变形条件下由梁理论, 有

$$w_b = \frac{\left(M_{bx} \sin \frac{\alpha}{2} + M_{by} \cos \frac{\alpha}{2} \right) b^2}{2EI_y} = \frac{\sqrt{3}mL^3(\mu + 3)}{8EI_y} \quad (29)$$

因为该单胞是构成纯弯石墨层的周期结构, 单胞在载荷作用下其边界上的 3 个 C 原子必须位于石墨层的纯弯面上 (图 4(c)), 所以

$$w_b = \frac{1}{2} \kappa_y \left(b \cos^2 \frac{\alpha}{2} \right) = \frac{3}{8} \frac{mL^2}{D} \quad (30)$$

而由图 4(c) 可以看出, 单胞中间的 C 原子并不在石墨层的纯弯面上, 这是由于石墨层不是中心对称结构, 不满足 Cauchy-Born 准则所致 [8]. 由式 (29), (30) 可得

$$\frac{EI_y}{L} = \frac{\sqrt{3}(\mu + 3)D}{3} = 0.25 \text{ nN} \cdot \text{nm} \quad (31)$$

用梁单元等效 C—C 键时, 图 4 所示石墨层纯弯曲的变形能储存于梁单元的变形中. 根据薄板理论, 单胞内的变形能为

$$U_{\text{cell}} = \frac{D}{2} \iint \kappa_y^2 dx dy = \frac{3\sqrt{3}m^2L^2}{4D} \quad (32)$$

而由梁理论, 单胞中的变形能为 a 键的弯曲变形能 U_{Ma} 以及 b 键的弯曲变形能 U_{Mb} 和扭转变形能 U_{Tb} 之和, 即

$$U_{\text{cell}} = U_{Ma} + 2U_{Mb} + 2U_{Tb} \quad (33)$$

其中

$$U_{Ma} = \frac{M_{ay}^2 L}{2EI_y} = \frac{3\mu^2 m^2 L^3}{2EI_y} \quad (34)$$

$$U_{Mb} = \frac{\left(M_{bx} \sin \frac{\alpha}{2} + M_{by} \cos \frac{\alpha}{2} \right)^2 b}{2EI_y} = \frac{3(\mu + 3)^2 m^2 L^3}{32EI_y} \quad (35)$$

$$U_{Tb} = \frac{\left(M_{bx} \cos \frac{\alpha}{2} - M_{by} \sin \frac{\alpha}{2} \right)^2 b}{2GJ} = \frac{9(1 - \mu)^2 m^2 L^3}{32GJ} \quad (36)$$

由式 (33)~(36), 联立式 (7)~(11) 可得

$$\frac{GJ}{L} = 0.21 \text{ nN} \cdot \text{nm} \quad (37)$$

综合式 (21), (22), (31), (37) 即得

$$\left. \begin{aligned} \frac{EA}{L} &= 730 \text{ nN/nm} \\ \frac{EI_y}{L} &= 0.25 \text{ nN} \cdot \text{nm} \\ \frac{EI_z}{L} &= 0.67 \text{ nN} \cdot \text{nm} \\ \frac{GJ}{L} &= 0.21 \text{ nN} \cdot \text{nm} \end{aligned} \right\} \quad (38)$$

上式唯一确定了 C—C 键等效梁单元的 4 个独立参数. 基于以上 4 个参数即可构建单臂碳纳米管的空间梁单元有限元模型.

2.3 谐和势参数与等效梁单元参数之间的关系

2.1 和 2.2 节基于石墨层的本构方程由石墨层的宏观连续介质力学参数得出了 C—C 键等效梁单元的参数. 但是, 在原子尺度描述 C—C 键的是原子间作用势. 在前文分析的基础上, 我们同样可以通过分析石墨层的单轴拉伸和纯弯曲得到 C—C 键的谐和势参数与等效梁单元参数之间的关系.

用等效梁单元描述石墨层的单轴拉伸 (图 3) 时, 各 C—C 键的谐和势能 U_ρ 和 U_θ 分别由相应梁单元的轴向拉伸变形能 U_A 和面内弯曲变形能 U_M 等效. 对于 b 键, 图 3(e) 中键的伸长和面内键角变化由其相应等效梁单元的伸长和面内弯曲来等效 (图 3(d)), 其中

$$d\beta = \frac{1}{2} d\alpha = \frac{v}{L} = \frac{FL}{24} \left(\frac{L}{EI_z} \right) \quad (39)$$

因此 b 键的谐和势能为

$$U_\rho = \frac{1}{2} K_\rho (db)^2 \quad (40)$$

$$U_\theta = 2 \left(\frac{1}{2} K_\theta (d\beta)^2 + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} K_\theta (d\alpha)^2 \right) = 3K_\theta \left(\frac{FL^2}{24EI_z} \right)^2 \quad (41)$$

而 b 键等效梁单元的变形能为

$$U_A = \frac{1}{2} \int_0^b \frac{F^2}{EA} d\xi = \frac{1}{2} \frac{EA}{L} (db)^2 \quad (42)$$

$$U_M = \frac{1}{2} \int_0^b \frac{[M(1 - 2\xi/b)]^2}{EI_z} d\xi = \frac{F^2 L^3}{96EI_z} \quad (43)$$

式中 ξ 为 b 键的局部坐标 (图 3(e)). 对比式 (41), (42) 与式 (42), (43), 由其相应能量的等效关系可得

$$\frac{EA}{L} = K_\rho \quad (44)$$

$$\frac{EI_z}{L} = \frac{1}{2} K_\theta \quad (45)$$

对于石墨层的纯弯曲 (图 4), 各 C—C 键的谐和势能 U_ω 和 U_τ 分别由相应等效梁单元的离面弯曲变形能 U_M 和扭转变形能 U_T 来等效. 对于 b 键, 图 4(d) 中键的离面键角变化和轴向扭转由图 4(c) 所示梁单元的离面弯曲和扭转来等效. 由于在垂直于 σ 面的方向不受力, 因此各等效梁单元处于离面纯弯曲和轴向均匀扭转状态. 若设 b 键的离面弯曲载荷和扭转载荷分别为 M_b 和 T_b , 则

$$d\omega_b = \frac{w_b}{b} = \frac{M_b L}{2EI_y} \quad (46)$$

$$d\varphi_b = \frac{T_b L}{GJ} \quad (47)$$

因此 b 键的谐和势能为

$$U_\omega = 2 \left[\frac{1}{2} K_\omega (d\omega_b)^2 \right] = \frac{K_\omega}{4} \left(\frac{M_b L}{EI_y} \right)^2 \quad (48)$$

$$U_\tau = \frac{1}{2} K_\tau (d\varphi_b)^2 = \frac{1}{2} K_\tau \left(\frac{T_b L}{GJ} \right)^2 \quad (49)$$

而 b 键等效梁单元的变形能为

$$U_M = \frac{M_b^2 L}{2EI_y} \quad (50)$$

$$U_T = \frac{T_b^2 L}{2GJ} \quad (51)$$

比较式 (48), (49) 与式 (50), (51), 由其相应能量项的等效可得

$$\frac{EI_y}{L} = \frac{1}{2} K_\omega \quad (52)$$

$$\frac{GJ}{L} = K_\tau \quad (53)$$

综上可得等效梁单元参数与谐和势参数的关系为

$$\left. \begin{aligned} \frac{EA}{L} &= K_\rho, & \frac{EI_z}{L} &= \frac{1}{2} K_\theta \\ \frac{EI_y}{L} &= \frac{1}{2} K_\omega, & \frac{GJ}{L} &= K_\tau \end{aligned} \right\} \quad (54)$$

从文献 [19,20] 可以得到 C—C 键谐和势的力常数, 从而根据式 (54) 可以构建单臂碳纳米管的等效

梁单元有限元模型. 但是谐和势的力常数 K_ω 和 K_τ 在文献中并没有很明确的结论, 因此本文采用 2.1 和 2.2 节得到的等效梁单元的参数进行计算.

3 单臂碳纳米管杨氏模量和泊松比的计算

用式 (54) 确定的等效梁单元的参数构建单臂碳纳米管的空间梁单元有限元模型, 借助有限元软件 ANSYS, 分别计算单臂碳纳米管在拉力 F 和扭矩 T 作用下的拉伸和扭转 (图 5(a), 图 5(c)), 得到各节点的位移和转角 (图 5(b), 图 5(d), 用不同颜色表示位移的大小).

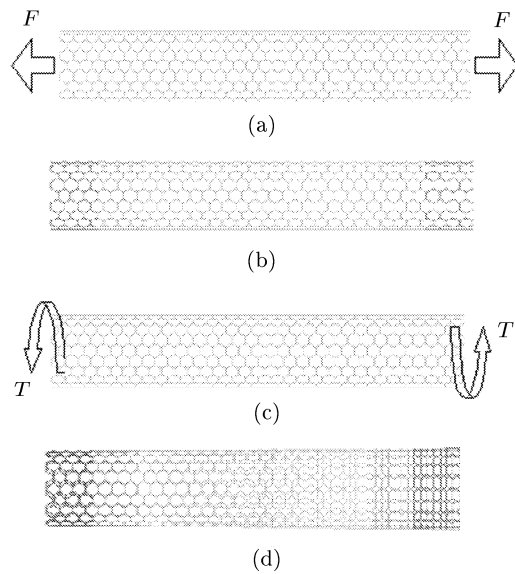


图 5 单臂碳纳米管的拉伸和扭转

Fig.5 Tension and torsion of single-walled carbon nanotubes

若碳纳米管的长度为 H , 半径为 R , 厚度为 t , 由 ANSYS 计算结果可以得到碳纳米管的变形量 ΔH 和扭转角 Φ , 于是碳纳米管的杨氏模量和剪切模量为

$$Y = \frac{F/(2\pi Rt)}{\Delta H/H} \quad (55)$$

$$S = \frac{T/(2\pi R^3 t)}{\Phi/H} \quad (56)$$

由于碳纳米管的厚度 t 的量值尚未有一个统一的结论 [3,5], 可以采用一种回避的方法, 定义等效模量

$$Y_{eq} = Yt = \frac{F/(2\pi R)}{\Delta H/H} \quad (57)$$

$$S_{eq} = St = \frac{T/(2\pi R^3)}{\Phi/H} \quad (58)$$

于是可以得到碳纳米管的泊松比

$$\nu = \frac{Y_{eq} - 2G_{eq}}{2G_{eq}} \quad (59)$$

计算得到 Armchair 和 Zigzag 碳纳米管的等效杨氏模量和泊松比随半径的变化关系如图 6 所示, 图中同时给出了 Chang 等^[5]用杆-弹簧模型(stick-spiral model)和 Popov 等^[9]用晶格动力学的方法得到的结果. 计算结果表明: (1) 半径较大时, 碳纳米管的杨氏模量和泊松比均趋近于石墨层的杨氏模量 $(C_{11}^2 - C_{12}^2)h/C_{11} = 350 \text{ nN/nm}$ 和泊松比 $C_{12}/C_{11} = 0.17$; (2) Armchair 和 Zigzag 碳纳米管的杨氏模量均随着半径的减小而减小, 但 Zigzag 管减小更快, 这与 Chang 等^[5]和 Popov 等^[9]以及 Li 等^[11]的计算结果是一致的(量值上的变化只是由于选用的参数不同); (3) Armchair 碳纳米管的泊松比随半径的增大而减小, 而 Zigzag 管的泊松比随半径的增大而增大, 这与 Popov 等的结果是一致的, 但 Zigzag 管泊松比的变化趋势与 Chang 等的结果相反, 这是因为作者和 Popov 等的计算考虑了 C—C 键的伸长、面内键角变化、离面键角变化和扭转, 而 Chang 等只考虑了前两项, 因此, C—C 键

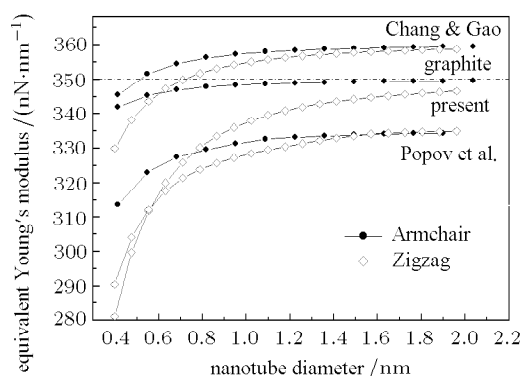
的离面键角变化和扭转对碳纳米管的泊松比的影响是显著的.

4 结 论

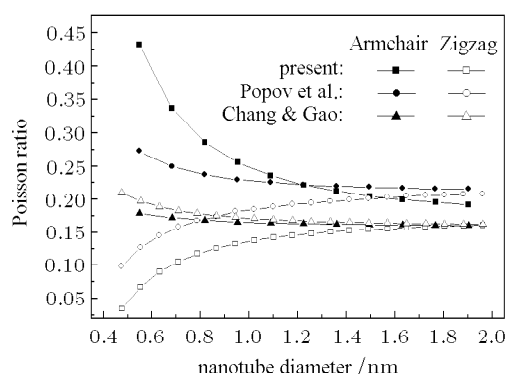
石墨层和单臂碳纳米管的 C—C 键在小变形条件下的势能可用谐和函数来描述, 这与梁单元的变形能具有相同的形式, 因此可以用梁单元等效 C—C 键的作用. 本文提出了一种 C—C 键的轴对称截面等效梁单元有限元模型, 该模型能够完备地等效 C—C 键的伸长、面内键角变化、离面键角变化和扭转. 我们通过分析石墨层的典型受载情况得到了等效梁单元的参数(式(38)), 以及等效梁单元参数与谐和势参数的关系(式(54)), 并用该模型计算了单臂碳纳米管的杨氏模量和泊松比, 计算结果为相关文献所验证, 表明该模型具有一定的实用性.

参 考 文 献

- 1 Iijima S. Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature*, 1991, 354: 56~58
- 2 Ohno K, Esfarjani K, Kawazoe Y. Computational Material Science: From ab Initio to Monte Carlo Methods, Springer, 1999
- 3 Yakobson BI, Brabec CJ, Bernholc J. Nanomechanics of carbon tubes: instabilities beyond linear response. *Physical Review Letters*, 1996, 76: 2511~2514
- 4 Ru CQ. Axially compressed buckling of a doublewalled nanotube embedded within an elastic medium. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2001, 49: 1265~1279
- 5 Chang T, Gao H. Size-dependent elastic properties of a single-walled carbon nanotube via a molecular mechanics model nanotubes. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2003, 51: 1059~1074
- 6 Shen L, Li J. Transversely isotropic elastic properties of single-walled carbon nanotubes. *Physical Review B*, 2004, 69: 045414
- 7 Xiao JR, Gama BA, Gillespie Jr. An analytical molecular structural mechanics model for the mechanical properties of carbon nanotubes. *International Journal of Solids and Structures*, 2005, 42: 3075~3092
- 8 Zhang P, Huang Y, Geubelle PH, et al. The elastic modulus of single-wall carbon nanotubes: a continuum analysis incorporating interatomic potentials. *International Journal of Solids and Structures*, 2002, 39: 3893~3906
- 9 Popov VN, Van Doren VE. Elastic properties of single-walled carbon nanotubes. *Physical Review B*, 61(4): 3078~3084
- 10 Zheng Q, Jiang Q. Multiwalled carbon nanotubes as gigahertz oscillators. *Physical Review Letters*, 2002, 88(4): 045503



(a)



(b)

图 6 单臂碳纳米管的杨氏模量和泊松比与半径的关系

Fig.6 Young's modulus and Poisson ratio of single-walled carbon nanotubes versus tube diameter

- 11 Li CY, Chou TW. A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes. *International Journal of Solids and Structures*, 2003, 40: 2487~2499
- 12 Tadmor EB, Ortiz M, Phillips R. Quasicontinuum analysis of defects in solids. *Philos Mag A*, 1996, 73 (6): 1529~1563
- 13 Liu B, Huang Y, Jiang H, et al. The atomic-scale finite element method. *Comput Methods Appl Mech Engrg*, 2004, 193: 1849~1864
- 14 Qian D, Wagner GJ, Liu WK. A multiscale projection method for the analysis of carbon nanotubes. *Comput Methods Appl Mech Engrg*, 2004, 193: 1603~1632
- 15 张田忠. 单壁碳纳米管屈曲的原子 / 连续介质混合模型. 力学学报, 2004, 36(6): 744~748 (Chang Tienzhong. Buckling of singled-walled carbon nanotubes via a hybrid atomic/continuum approach. *Acta Mechanica Sinica*, 2004, 36(6): 744~748 (in Chinese))
- 16 Qian D, Wagner GJ, Liu WK, et al. Mechanics of carbon nanotubes. *Appl Mech Rev*, 2002, 55 (2): 495~533
- 17 Odegard GM, Gates TS, Nicholson LM, et al. Equivalent-continuum modeling with application to carbon nanotubes. NASA/TM-2002-211454. 2002
- 18 Kelly BT. Physics of Graphite. London: Applied Science, 1981
- 19 Cornell WD, Cieplak P, Bayly CI, et al. A second generation force-field for the simulation of proteins, nucleic-acids, and organic-molecules. *Journal of American Chemical Society*, 1995, 117: 5179~5197
- 20 Jorgensen WL, Severance DL. Aromatic aromatic interactions—free-energy profiles for the benzene dimer in water, chloroform, and liquid benzene. *Journal of American Chemical Society*, 1990, 112: 4768~4774

FINITE ELEMENT MODEL WITH EQUIVALENT BEAM ELEMENTS OF SINGLE-WALLED CARBON NANOTUBES¹⁾

Li Haijun Guo Wanlin²⁾

(Institute of Nanoscience, College of Aerospace Engineering, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 210016, China)

Abstract Graphite sheet and single-walled carbon nanotube are integrated through Carbon-Carbon (C—C) covalent bonds. Under the assumption of small deformation, the potential of C—C bonds can be described by a harmonic function, with the same form as the strain energy function of beam elements, so beam elements can be used to describe C—C bonds. This paper presents a finite element model with equivalent beam elements, which can perfectly replace the harmonic potential to describe the bond stretching, bond angle variance, inversion angle variance and torsion of the C—C bonds. By the analysis of graphite sheet under typical loads, the parameters of the equivalent beam elements and the relation of the parameters of the equivalent beam elements vs the C—C bonds are obtained. By using the model, the elastic properties for achiral nanotubes are calculated. The results are in good agreement with the existing results.

Key words carbon nanotube, beam element, finite element, elastic properties, harmonic potential, molecular mechanics, continuum mechanics

Received 5 July 2005, revised 14 November 2005.

1) The project supported by the National Natural Science Foundation of China (10372044, 50275073), and Funding in Advance of Jiangsu Science and Technology Department.

2) E-mail: wlguo@nuaa.edu.cn