

学校编码: 10384
学号: 19920081152957

分类号__密级__
UDC __

厦 门 大 学

硕 士 学 位 论 文

基于有限元方法的含缺陷碳纳米管力学性能研究

Studies on the Mechanical Properties of Defective Carbon
Nanotubes Based on Finite Element Method

赵 琪

指导教师姓名: 陈立杰 副教授

专 业 名 称: 精密仪器及机械

论文提交日期: 2011 年 5 月

论文答辩时间: 2011 年 月

学位授予日期: 2011 年 月

答辩委员会主席: _____

评 阅 人: _____

2011 年 5 月

厦门大学学位论文原创性声明

本人呈交的学位论文是本人在导师指导下，独立完成的研究成果。本人在论文写作中参考其他个人或集体已经发表的研究成果，均在文中以适当方式明确标明，并符合法律规范和《厦门大学研究生学术活动规范（试行）》。

另外，该学位论文为（）课题（组）的研究成果，获得（）课题（组）经费或实验室的资助，在（）实验室完成。（请在以上括号内填写课题或课题组负责人或实验室名称，未有此项声明内容的，可以不作特别声明。）

声明人（签名）：

年 月 日

厦门大学学位论文著作权使用声明

本人同意厦门大学根据《中华人民共和国学位条例暂行实施办法》等规定保留和使用此学位论文，并向主管部门或其指定机构送交学位论文（包括纸质版和电子版），允许学位论文进入厦门大学图书馆及其数据库被查阅、借阅。本人同意厦门大学将学位论文加入全国博士、硕士学位论文共建单位数据库进行检索，将学位论文的标题和摘要汇编出版，采用影印、缩印或者其它方式合理复制学位论文。

本学位论文属于：

1. 经厦门大学保密委员会审查核定的保密学位论文，
于 年 月 日解密，解密后适用上述授权。

2. 不保密，适用上述授权。

（请在以上相应括号内打“√”或填上相应内容。保密学位论文应是已经厦门大学保密委员会审定过的学位论文，未经厦门大学保密委员会审定的学位论文均为公开学位论文。此声明栏不填写的，默认为公开学位论文，均适用上述授权。）

声明人（签名）：

年 月 日

摘 要

碳纳米管具有极其优异的力学性能,是目前已知的弹性模量和抗拉强度最高的材料,其潜在应用价值巨大,是开发价值最高的纳米材料之一。因此对碳纳米管的结构和特性,特别是含缺陷碳纳米管的力学行为的研究对其实际应用是非常必要的。本文基于分子结构力学理论,采用有限元方法建立了单壁和多壁碳纳米管的有限元模型,研究了碳纳米管的若干力学性能,主要包括以下内容:

(1) 建立碳纳米管的有限元模型。本文建立了单壁和多壁碳纳米管的有限元模型,并实现了模型中缺陷类型、数量、位置、密度的参数化。

(2) 碳纳米管的弹性常数计算。本文计算了碳纳米管的弹性模量、剪切模量、泊松比,并分析了各类因素对弹性常数的影响。计算结果表明,单壁碳纳米管的弹性常数随长径比的变化曲线出现分段现象,相邻段之间没有平缓过渡。在本文研究的各类使碳纳米管的弹性性能降低的缺陷中,最危险的是双原子空位缺陷。范德华力作用使双壁碳纳米管的弹性模量略微降低。

(3) 碳纳米管的压缩屈曲行为模拟。本文对碳纳米管的屈曲临界载荷、临界屈曲应变进行了计算,并对影响屈曲行为的因素进行了分析。研究发现,相同长度的单壁碳纳米管承受临界压缩屈曲应变的能力有一个最优直径,处在该直径的单壁碳纳米管承载能力最强。缺陷位置越接近单壁碳纳米管的中间部位,屈曲临界载荷和临界屈曲应变减小的幅度越大。在某些特定的周向缺陷间隔角度处,屈曲临界载荷和临界屈曲应变具有极大值与极小值。范德华力作用使双壁碳纳米管的临界屈曲应变增大。

(4) 碳纳米管的振动行为研究。本文对碳纳米管的固有频率和振动模态进行了计算,并分析了各类因素对振动行为的影响。研究发现,单壁碳纳米管的第一阶固有频率随着直径的增大先呈线性增大至最大值后再分阶段缓慢减小。第一阶固有频率随着轴向缺陷之间间隔距离的增大而近似的呈线性关系减小。范德华力作用使双壁碳纳米管的第一阶固有频率增大。

关键词: 碳纳米管 有限元方法 缺陷 屈曲 振动

厦门大学博硕士论文摘要库

Abstract

Carbon nanotubes (CNTs), one of the best nanometer materials, are known for the supreme elastic modulus and tensile strength. Due to the excellent mechanical properties, CNTs exhibit great potential application value. Therefore, it is necessary to study the mechanical properties of CNTs, especially for defective CNTs. In this thesis, based on the molecular structure mechanics, finite element method is used to establish the models of single-walled carbon nanotubes (SWCNTs) and multi-walled carbon nanotubes (MWCNTs) to investigate several mechanical problems of CNTs. The main contents are as follows.

(1) Finite element modeling of CNTs. SWCNTs and MWCNTs models are obtained. The type, number, location and density of defects in models are parameterized.

(2) Calculations of the elastic constants of CNTs. Elastic modulus, shear modulus and Poisson's ratio are calculated. The effects of factors on the elastic constants are investigated. The results indicate that the most dangerous defect is double-atom vacancy defect. Van der Waals forces decrease the elastic modulus of DWCNTs slightly.

(3) Simulation of the compression buckling behavior of CNTs. The critical buckling loads and strains are calculated. The effects of factors on them are investigated. The results indicate that there is an optimum diameter at which the critical compression buckling strain of SWCNTs with the same lengths reaches its maximum value. The critical buckling loads and strains decrease much more when the location of the defects is close to the middle of SWCNTs. Van der Waals forces increase the critical buckling strains of DWCNTs.

(4) Analysis of the vibration properties of CNTs. The natural frequencies and vibration modes are investigated. The effects of factors on them are analyzed. The results indicate that the 1st natural frequencies of SWCNTs decrease linearly with the increasing of the axial distance between two defects. Van der Waals forces increase the 1st natural frequencies of DWCNTs.

Keywords: Carbon Nanotubes; Finite Element Method; Defects; Buckling; Vibration

厦门大学博硕士学位论文摘要库

目 录

摘要	I
ABSTRACT	III
第一章 绪论	1
1.1 碳纳米管概述	1
1.2 碳纳米管的力学性能及应用	4
1.3 碳纳米管力学行为的主要研究方法及现状	5
1.4 本文的主要研究内容	8
第二章 碳纳米管的有限元模型	10
2.1 碳纳米管的几何结构	10
2.2 分子结构力学方法的等效理论	11
2.3 单壁碳纳米管有限元模型的建立	14
2.3.1 任意手性的单壁碳纳米管有限元模型	14
2.3.2 扶手椅型单壁碳纳米管有限元模型	15
2.3.3 锯齿型单壁碳纳米管有限元模型	16
2.3.4 含缺陷的单壁碳纳米管有限元模型	16
2.4 多壁碳纳米管有限元模型的建立	17
2.4.1 范德华力的模拟	17
2.4.2 多壁碳纳米管有限元模型	18
2.4.3 含缺陷的多壁碳纳米管有限元模型	19
2.5 本章小结	20
第三章 单壁碳纳米管的弹性常数计算	21
3.1 单壁碳纳米管的弹性常数计算的理论基础	21
3.1.1 弹性模量确定方法	21
3.1.2 剪切模量确定方法	22
3.1.3 泊松比确定方法	22
3.2 直径对单壁碳纳米管的弹性常数的影响	23
3.2.1 直径对弹性模量和剪切模量的影响	23
3.2.2 直径对泊松比的影响	25

3.3 管长对单壁碳纳米管的弹性常数的影响	26
3.3.1 管长对弹性模量和剪切模量的影响.....	26
3.3.2 管长对泊松比的影响.....	28
3.4 长径比对单壁碳纳米管的弹性常数的影响	29
3.4.1 长径比对弹性模量和剪切模量的影响.....	29
3.4.2 长径比对泊松比的影响.....	30
3.5 缺陷对单壁碳纳米管的弹性常数的影响	31
3.5.1 缺陷类型对弹性模量和剪切模量的影响.....	31
3.5.2 缺陷位置对弹性模量和剪切模量的影响.....	32
3.5.3 缺陷类型对泊松比的影响.....	33
3.5.4 缺陷位置对泊松比的影响.....	33
3.6 本章小结	34
第四章 单壁碳纳米管的屈曲行为研究	36
4.1 屈曲载荷的理论计算	36
4.2 单壁碳纳米管的屈曲载荷和屈曲模态研究	37
4.2.1 直径对屈曲临界载荷的影响.....	38
4.2.2 直径对屈曲模态的影响.....	39
4.2.3 管长对屈曲临界载荷的影响.....	40
4.2.4 管长对屈曲模态的影响.....	41
4.2.5 长径比对屈曲临界载荷的影响.....	43
4.2.6 缺陷对屈曲载荷的影响.....	43
4.3 单壁碳纳米管的临界屈曲应变研究	48
4.3.1 直径对临界屈曲应变的影响.....	48
4.3.2 长径比对临界屈曲应变的影响.....	49
4.3.3 缺陷对临界屈曲应变的影响.....	51
4.4 本章小结	53
第五章 单壁碳纳米管的振动行为研究	55
5.1 碳纳米管的振动行为的理论分析	55
5.2 单壁碳纳米管的固有频率的研究	56
5.2.1 直径对第一阶固有频率的影响.....	57
5.2.2 管长（长径比）对第一阶固有频率影响.....	57
5.2.3 缺陷对固有频率的影响.....	58

5.3 单壁碳纳米管的振动模态研究·····	62
5.4 本章小结·····	63
第六章 多壁碳纳米管的力学性能研究·····	65
6.1 多壁碳纳米管的弹性模量·····	65
6.1.1 弹性模量确定方法·····	65
6.1.2 内层碳纳米管的直径对弹性模量的影响·····	66
6.1.3 长径比对弹性模量的影响·····	67
6.2 多壁碳纳米管的屈曲行为·····	69
6.2.1 前十阶屈曲应变·····	69
6.2.2 长径比对临界屈曲应变的影响·····	70
6.2.3 长径比对临界屈曲模态的影响·····	72
6.3 多壁碳纳米管的振动行为·····	74
6.3.1 前十阶固有频率·····	74
6.3.2 长径比对第一阶固有频率的影响·····	76
6.3.3 长径比对第一阶振动模态的影响·····	77
6.4 本章小结·····	78
第七章 总结·····	80
参考文献·····	83
致谢·····	89
攻读硕士学位期间发表的论文·····	90

Table of Contents

Abstract.....	I
Contents.....	III
Chapter 1 Introduction.....	1
1.1 Background.....	1
1.2 Mechanical properties and applications of CNTs.....	4
1.3 Methods and research status.....	5
1.4 Outline of this thesis.....	8
Chapter 2 Finite element models of CNTs.....	10
2.1 Geometric structure of CNTs.....	10
2.2 Equivalence theory in molecular structure mechanics.....	11
2.3 Finite element models of SWCNTs.....	14
2.3.1 Arbitrary chiral SWCNTs.....	14
2.3.2 Armchair SWCNTs.....	15
2.3.3 Zigzag SWCNTs.....	16
2.3.4 SWCNTs with defects.....	16
2.4 Finite element models of MWCNTs.....	17
2.4.1 Simulation of Van der Waals' force.....	17
2.4.2 MWCNTs.....	18
2.4.3 MWCNTs with defects.....	19
2.5 Conclusion.....	20
Chapter 3 Calculations of the elastic constants of SWCNTs.....	21
3.1 Methods of the calculations.....	21
3.1.1 Elastic modulus.....	21
3.1.2 Shear modulus.....	22
3.1.3 Poisson's ratio.....	22
3.2 Effects of diameter on the elastic constants.....	23
3.2.1 Elastic modulus and Shear modulus.....	23
3.2.2 Poisson's ratio.....	25
3.3 Effects of length on the elastic constants.....	26
3.3.1 Elastic modulus and Shear modulus.....	26
3.3.2 Poisson's ratio.....	28

3.4 Effects of length-diameter ratio on the elastic constants.....	29
3.4.1 Elastic modulus and Shear modulus.....	29
3.4.2 Poisson's ratio.....	30
3.5 Effects of defects on the elastic constants.....	31
3.5.1 Effects of defect types on Elastic modulus and Shear modulus.....	31
3.5.2 Effects of defect types on Poisson's ratio.....	32
3.5.3 Effects of defect location on Elastic modulus and Shear modulus.....	33
3.5.4 Effects of defect location on Poisson's ratio.....	33
3.6 Conclusion.....	34
Chapter 4 Simulation of the buckling behavior of SWCNTs.....	36
4.1 Calculations of the buckling load.....	36
4.2 Buckling loads and modes.....	37
4.2.1 Effects of diameter on the critical buckling loads.....	38
4.2.2 Effects of diameter on the buckling modes.....	39
4.2.3 Effects of length on the critical buckling loads.....	40
4.2.4 Effects of length on the buckling modes.....	41
4.2.5 Effects of length-diameter ratio on the critical buckling loads.....	43
4.2.6 Effects of defects on the buckling modes.....	43
4.3 Critical buckling strains.....	48
4.2.1 Effects of diameter on the critical buckling strains.....	48
4.2.5 Effects of length-diameter ratio on the critical buckling strains.....	49
4.2.6 Effects of defects on the critical buckling strains.....	51
4.4 Conclusion.....	53
Chapter 5 Analysis of the vibration properties of SWCNTs.....	55
5.1 Calculations of the natural frequencies.....	55
5.2 Natural frequencies.....	56
5.2.1 Effects of diameter on the 1st natural frequencies.....	57
5.2.2 Effects of length on the 1st natural frequencies.....	57
5.2.3 Effects of defects on the natural frequencies.....	58
5.3 Vibration modes.....	62
5.4 Conclusion.....	63
Chapter 6 Mechanical properties of MWCNTs.....	65
6.1 Elastic modulus.....	65
6.1.1 Methods of the calculations.....	65
6.1.2 Effects of diameters of the inner CNTs.....	66

6.1.3 Effects of length-diameter ratio of the inner CNTs.....	67
6.2 Buckling behavior.....	69
6.2.1 The first ten buckling strains.....	69
6.2.2 Effects of length-diameter ratio on the critical buckling strains.....	70
6.2.3 Effects of length-diameter ratio on the critical buckling modes.....	72
6.3 Vibration properties.....	74
6.3.1 The first ten natural frequencies.....	74
6.3.2 Effects of length-diameter ratio on the 1st natural frequencies.....	76
6.3.3 Effects of length-diameter ratio on the 1st vibration modes.....	77
6.4 Conclusion.....	78
Chapter 7 Conclusion.....	80
Reference.....	83
Acknowledgement.....	89
Appendix.....	90

第一章 绪论

1.1 碳纳米管概述

(1) 碳纳米管的发现

1991年,日本的 Iijima 在实验过程中发现了多层同轴管状的碳分子,这就是今天被广泛关注的碳纳米管^[1]。当时 Iijima 发现的碳纳米管中没有单壁碳纳米管,在随后的 1993 年, Iijima 等^[2]和 IBM 公司的 Bethune 等^[3]分别制备出了单壁碳纳米管。豆荚型碳纳米管^[4]、Y 型分支碳纳米管^[5]、管状石墨锥^[6]等大量异型碳纳米管也相继被制备出来。

(2) 碳纳米管的结构

图 1.1 是石墨层原子结构图,一个碳原子与其周围的三个碳原子之间形成 C-C 化学键,邻近的化学键形成正六边形结构,多个正六边形结构组成网状的石墨层原子结构。碳纳米管的结构相当于把石墨的平面组织卷成管状。单壁碳纳米管(SWNTs, Single Wall Carbon Nanotubes)可以看作由一层石墨层卷曲粘接而成的无缝中空管(图 1.2),其管体由六边形的碳原子网格构成,两端通常由五边形、六边形等组成的两个半球形的帽状结构封闭起来。多壁碳纳米管(MWNTs, Multi Wall Carbon Nanotubes)可以看作是由若干个同轴的单壁碳纳米管套接而成(图 1.3),其层间距离约为 0.34nm,与石墨的层间距大致相等^[1]。

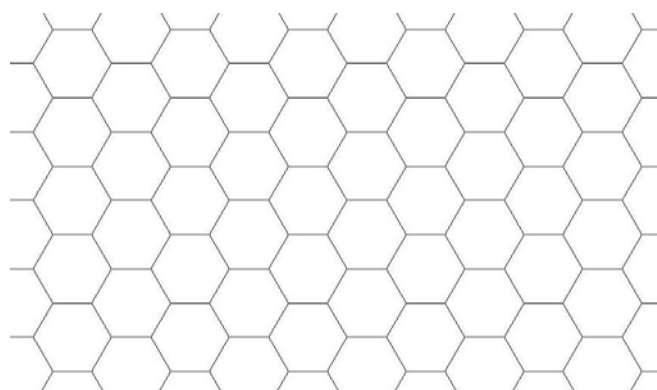


图 1.1 石墨层原子结构图

根据石墨层的不同卷曲方式，即碳六边形沿管轴向的不同取向，可以将单壁碳纳米管分成扶手椅型（Armchair）、锯齿型（Zigzag）和手性型（Chiral）单壁碳纳米管，如图 1.2 所示。

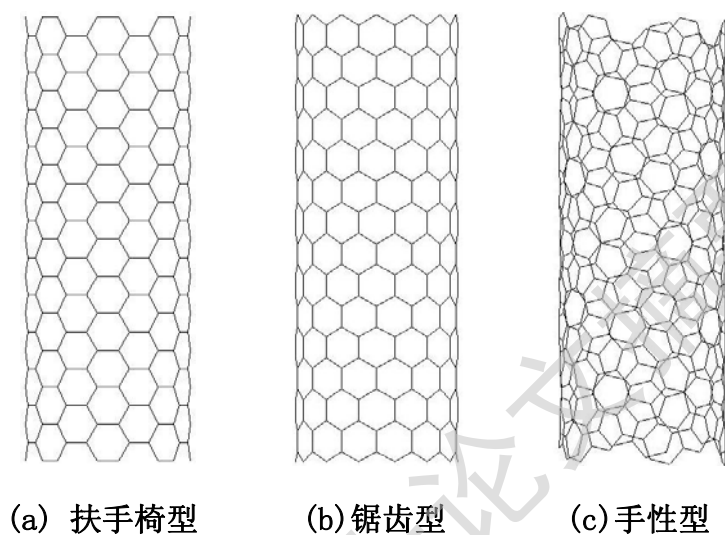


图 1.2 单壁碳纳米管的结构示意图

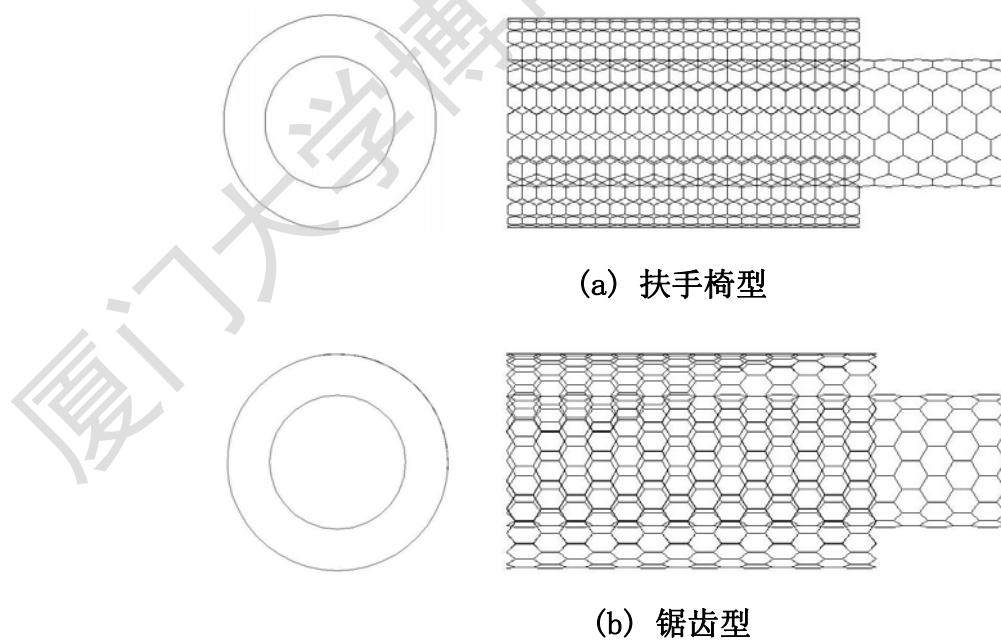


图 1.3 多壁碳纳米管的结构示意图

由于制造工艺的限制，碳纳米管在实际制备中几乎无法获得完美结构，各类

缺陷不可避免地存在于碳纳米管壁中。主要的缺陷形式有原子空位缺陷(包括单原子空位缺陷和双原子空位缺陷等,如图 1.4、1.5 所示)、Stone-Wales 缺陷(即 SW 缺陷,由于 C-C 键绕其中点旋转 90° ,致使局部出现 2 个五边形环和 2 个七边形环的结构,又称“5-7-5 缺陷”,如图 1.6、1.7 所示)和其他非拓扑结构缺陷等。

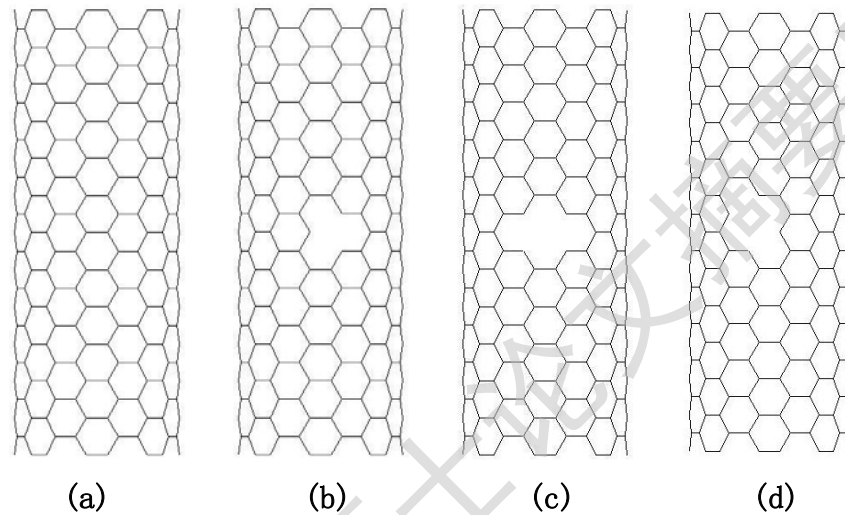


图 1.4 含原子空位缺陷的(8,8)单壁碳纳米管的结构示意图:(a) 不含缺陷,(b) 单原子空位缺陷,(c) 双原子空位缺陷类型一,(d) 双原子空位缺陷类型二

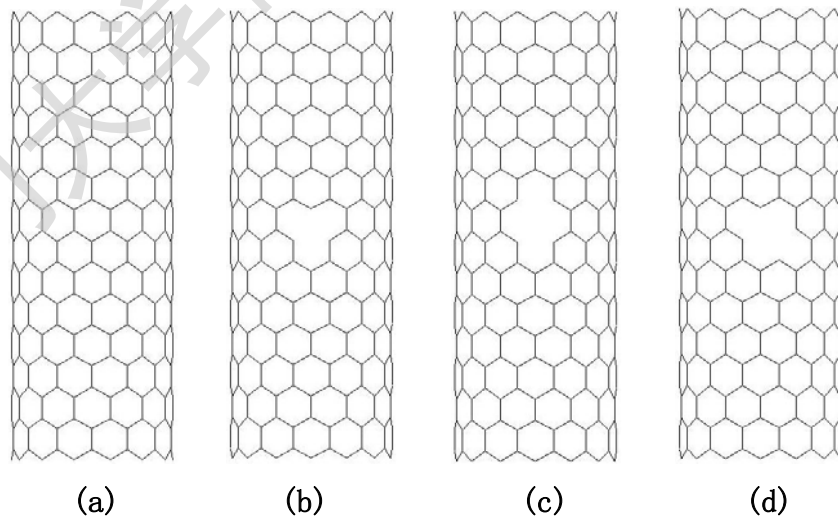


图 1.5 含原子空位缺陷的(14,0)单壁碳纳米管的结构示意图:(a) 不含缺陷,(b) 单原子空位缺陷,(c) 双原子空位缺陷类型一,(d) 双原子空位缺陷类型二

Degree papers are in the "[Xiamen University Electronic Theses and Dissertations Database](#)". Full texts are available in the following ways:

1. If your library is a CALIS member libraries, please log on <http://etd.calis.edu.cn/> and submit requests online, or consult the interlibrary loan department in your library.
2. For users of non-CALIS member libraries, please mail to etd@xmu.edu.cn for delivery details.

厦门大学博硕士论文摘要库