

微纳米力学

S14 CCTAM2009-002998

基于原子势的碳纳米管有限变形壳体理论

吴坚*, 黄克智*, 黄永刚†

* 清华大学, 北京 100084

† 美国西北大学

建立基于原子势的碳纳米管纳米尺度的连续壳体理论。通过修正的 Cauchy-Born 律将原子势直接引入到碳纳米管连续壳体理论中。该壳理论不仅考虑了应变, 而且考虑了曲率的影响。这种基于原子势的连续壳体理论用于研究碳纳米管的若干重要力学性能。

采用该壳体理论研究单壁碳纳米管的弹性模量, 解决“Yakobson 佯谬”。在实验测量和理论研究中, 单壁碳纳米管的杨氏模量 E_{CNT} 和厚度 t 总是以 $E_{CNT}t$ 的形式出现。因此没有必要单独定义单壁碳纳米管的杨氏模量和厚度。基于原子势的纳米连续壳体理论通过原子势解析地给出了 $E_{CNT}t$ 。关于单壁碳纳米管的以往工作可以分为两类: 一类是取石墨烯片层间间距 0.34nm 为碳纳米管的厚度, 得到的杨氏模量约为 1TPa; 另一类是基于经典壳体理论的模型, 给出碳纳米管的厚度为 0.066nm, 杨氏模量为 5.5TPa。这两类模型得到的杨氏模量差异很大, 被称作为“Yakobson 佯谬”。这两类模型给出的 $E_{CNT}t$ 值几乎相同: 第一类为 0.34 TPa·nm, 第二类为 0.34TPa·nm。

S14 CCTAM2009-002999

聚合物凝胶相变微观组织中应力的演化

周进雄

西安交通大学航天航空学院, 西安 710049

聚合物网络可以大量吸收溶剂分子而形成凝胶, 凝胶在室温下一般是透明的。如果将凝胶调制到不稳定的温度范围, 凝胶就会发生微观组织的相分离而变得不透明。通过温度调制, 凝胶可以实现透明—不透明之间的可逆切换, 这一特性可以被用来设计智能显示器件。本文基于双流体模型和金兹堡—朗道理论, 建立了凝胶相变的动力学方程, 其基本变量为聚合物体积分数和网络变形的左柯西张量。提出了谱方法和各向同性有限差分法耦合的杂交数值方法求解动力学演化方程, 避免了四阶导数对显式差分法时间步长的限制, 具有较好的收敛性和数值精度。数值模拟了凝胶各向同性溶胀后发生失稳分解微观组织的演化过程, 在相变初期凝胶分离为聚合物富集相和溶剂富集相的双连续相结构, 随着相变过程的进行, 微观组织浓度和应力同时演化, 聚合物富集相逐渐形成稳定的网络结构, 由相变导致的应力主要由聚合物富集相的网络结构承担, 数值模拟结果和已有实验结果吻合较好。同时发现溶剂富集相的公共顶点区域等效应力最小, 而顶点之间的聚合物网络区等效应力最大, 网络结构可能在这些区域最先破坏。应力场的梯度使凝胶微观组织粗化过程放慢, 导致“冻结”效应, 应力和浓度的共同演化和竞争

决定微观组织形貌和相变动力学过程。国家自然科学基金 (10872157) 资助项目。

关键词: 凝胶, 相变, 失稳分解, 应力, 扩散

S14 CCTAM2009-003000

纳米尺度表/界面力电耦合的分子动力学/第一原理模拟

赵亚涛

中国科学院力学研究所, 非线性力学国家重点实验室, 北京 100190

在纳米尺度下, 表/界面上力、电行为相互影响、密不可分。这种表/界面力电耦合的属性显著地影响着纳米器件的设计、制备和应用。本报告主要从固气、固液界面等方面讨论纳米尺度表/界面动力学的力电耦合属性对于纳米器件的影响。主要内容如下:

(1) 固气界面。纳米气体传感器的尺寸已经与耗尽层尺度相当。在该尺度下, 表面应力和电荷转移耦合、影响, 引起表面能带变化, 已经不能够用传统的方法解释。在传感材料和气体之间的界面上, 力电耦合的属性对于气体传感器的传感性质有着重要的影响。表征气体传感器的两大属性为: 选择性和灵敏度。当前, 对于气体传感器的实验研究仅能通过定性的模型和大量的实验来被动地选择目标气体和材料。本课题组通过量子力学的计算: (a) 主动地选择目标气体和材料, 确定选择性; (b) 定量地计算材料对于特定气体的灵敏度; (c) 提出了气体传感的新机理, 即表面应力的改变及与电荷转移的耦合作用对于气体传感的影响, 并直观显示该动态吸附过程。

(2) 固液界面。自然界中, 生物纳米通道对离子和水的传输具有选择性, 其中的电子转移和电压门控的机理尚未清楚。纳米通道与受限流体之间存在大面积的原子接触, 导致两者之间很强的相互作用, 甚至引起通道载流子和流体电荷之间的重新分布, 进而在通道两端产生稳定电压。这对于 MEMS/NEMS、生物制药等领域中亟待解决的器件自供电问题有着急迫、重要的意义。我们通过分子动力学 (MD) 和密度泛函理论 (DFT) 相互迭代的方法, 从原子层次上验证了有水流过的碳管结构可以作为纳米发电机或者能源收集装置, 解释由于在固液界面上力电耦合的作用该结构产生电压的机理。国家“973”(2007CB310500) 和“863”计划 (2007AA04Z348) 资助项目

S14 CCTAM2009-003001

基于微梁及其阵列的传感技术研究

张青川

中国科学技术大学, 中科院材料力学行为和设计重点实验室, 合肥 230027

介绍近年来中国科技大学光测实验室在基于微悬臂梁传感技术的研究进展, 包括光学读出双材料微梁阵列红外成像技术、微梁温度传感技术、大分子构象转变微梁传感技术和小分子抗原抗体检测结果。其中, 微梁阵列红外