

力学所在纳米材料弹性理论研究中取得进展

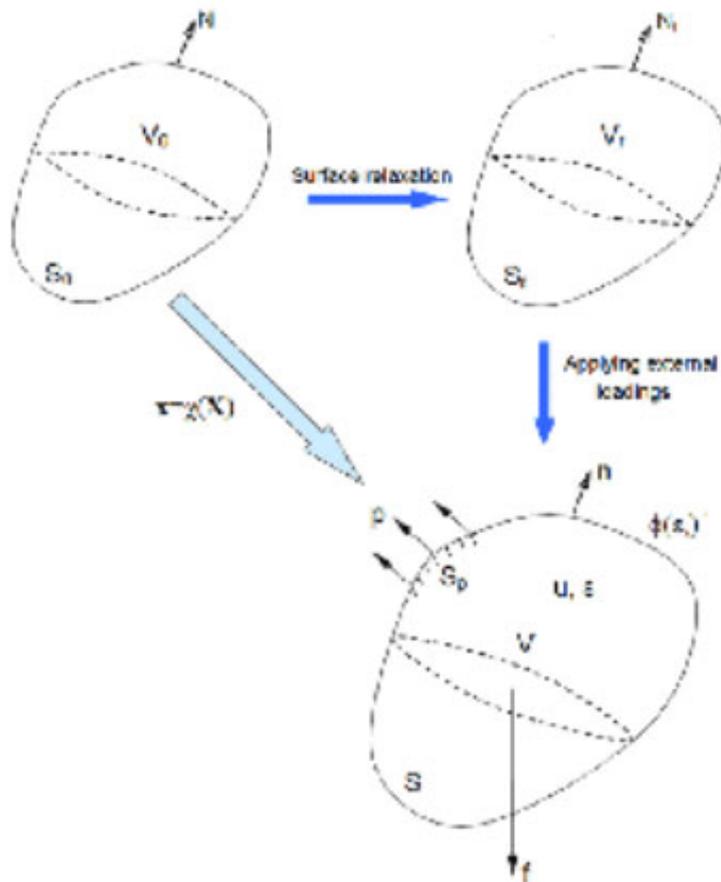


图1：三维纳米固体经历参考构型、中间构型及当前构型三阶段

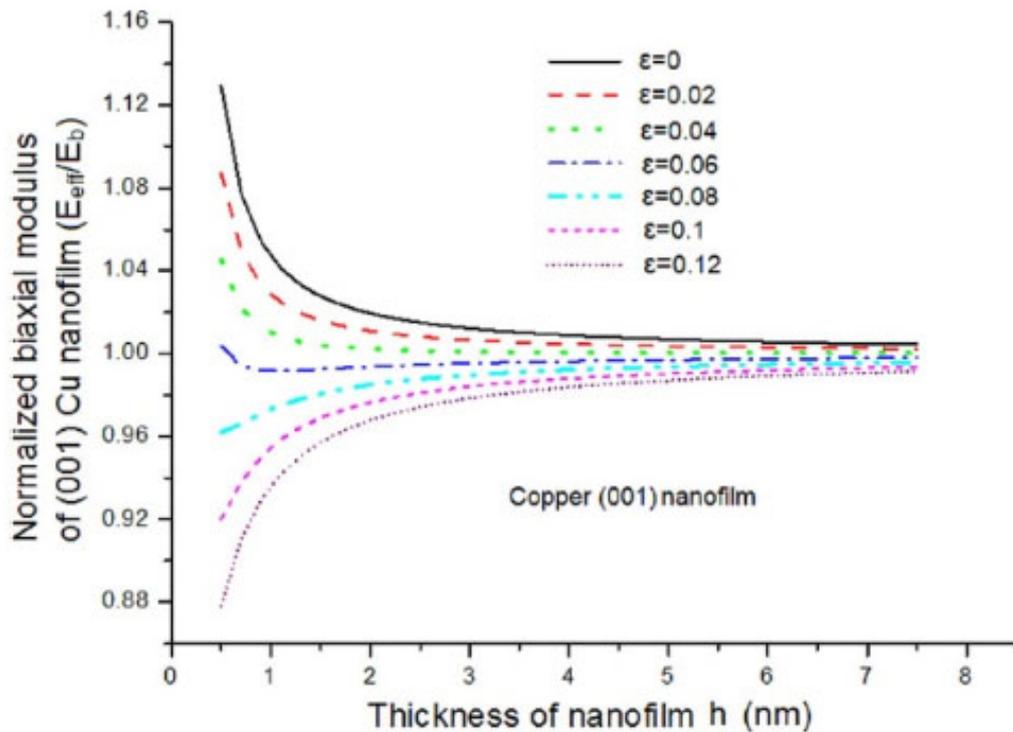


图2：Cu纳米薄膜双轴拉伸等效模量随薄膜厚度及外载应变的变化

纳米材料较大的表面积与体积比导致其力学行为呈现尺寸相关性(即纳米材料表面效应)，经典连续介质力学理论与尺寸无关，不再适用于预测纳米材料力学行为，发展考虑表面效应的弹性力学理论成为必要。

已有考虑表面效应的理论模型多基于表面弹性理论，即将纳米材料的表面看成无厚度表面层，且符合表面弹性本构关系，不可避免地引入表面弹性常数。目前为止，实验无法测量该表面弹性常数，数值方法(例如分子动力学)对表面弹性常数的确定亦受势函数选择、数值模型尺寸、表面原子层数的选择等因素影响。

鉴于以上原因，中国科学院力学研究所仿生材料与固体的微尺度力学科技组在连续介质力学框架下，基于表面能密度发展了一种描述纳米材料表面效应的理论模型，并合理表征多种典型纳米材料的实验力学行为。

相比于经典弹性力学理论，纳米材料总势能除了外力功和体内弹性应变能外，还包括表面自由能(当前构型的表面自由能包括表面弛豫及外载引起的表面能，如图1所示)。通过变分原理得到纳米材料体内平衡方程以及边界条件。考虑纳米材料表面的影响，体内平衡方程没有发生任何改变，只是边界条件中额外增加了表面引起的面力项。在已有理论中，表面引起的面力与表面应力相关，而表面应力与表面应变符合表面弹性本构关系。新的理论中，应用虚功原理建立纳米材料表面能密度与表面引起面力的解析关系，而纳米材料表面能密度依赖于块体材料的表面能密度及纳米材料表面弛豫参数，避免了表面弹性常数的引入，仅包含物理意义明确的块体材料表面能密度和表面晶格弛豫参数，两类参数可以通过实验及简单数值计算获得，目前在材料手册或文献中亦可获得。

应用新理论模型解析表征了纳米薄膜双轴拉伸、固支及悬臂纳米梁弯曲、纳米梁振动频率、纳米颗粒表面能密度等问题中材料力学行为的尺寸效应，得到了与已有实验、数值计算一致的结果。进一步发现：无外载情况下的表面晶格收缩使得纳米材料发生硬化；当施加拉伸载荷时，随着拉伸应变的增大，纳米材料逐渐由硬化转为软化，如图2所示；揭示了纳米材料表现出的软化及硬化现象实质是表面弛豫压应变与外载产生拉应变竞争的结果。

上述研究获得国家自然科学面上基金、国际杰出青年科学基金以及科技部纳米“973”项目基金的支持。

相关结果发表在ASME: J. Appl. Mech. (2014, 81, 121002)，作者：陈少华，姚寅；Comp. Mater. Sci. (2014, 82, 372-377)，作者：张存，姚寅，陈少华；Surf. Sci. (2015, 636, 19-24)，作者：姚寅，魏遥驰，陈少华；J. Nanosci. Naotech. (2015, in press)，作者：魏遥驰，陈少华。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/76739.html>