

DNA-微悬臂梁的 Rayleigh-Ritz 法求解*

刘承^{1,2}, 何小兵¹, 沈旭栋³

(1. 重庆交通大学 土木工程学院, 重庆 400074;

2. 浙江建设职业技术学院 建筑工程学院, 杭州 311231;

3. 浣江实验室 软体机器人与智能器件研究中心, 浙江 诸暨 311816)

摘要: DNA-微悬臂梁因其纳米力学特性在生物传感领域极具应用价值,但其均匀曲率和中性轴轴向应变假设缺乏验证.为此,建立液晶态 DNA 分子层自由能与组合梁结构变形耦合的泛函势能模型,创新性地引入三角级数模态叠加法表征位移场进行 Rayleigh-Ritz 法变分求解,并结合分段积分策略实现全域自由能计算.采用不动点迭代算法求解关于 Ritz 系数的非线性方程组后,得到悬臂梁变形及 DNA 链间距分布.结果表明,变形后曲率呈现显著的均匀特性,为均匀性假设提供了理论依据.收敛性分析表明:三角级数展开阶数 ≥ 10 ,且梁段划分数量 $\geq 2\ 500$,可确保挠度和应力求解精度,有效验证了均匀性假设在耦合模型中的正确性.

关键词: DNA-微悬臂梁; 纳米力学; 自由能; Rayleigh-Ritz

中图分类号: O39 **文献标志码:** A **DOI:** 10.21656/1000-0887.460067

The Rayleigh-Ritz Solution for DNA-Microcantilevers

LIU Cheng^{1,2}, HE Xiaobing¹, SHEN Xudong³

(1. School of Civil Engineering, Chongqing Jiaotong University,
Chongqing 400074, P.R. China;

2. Construction Engineering School, Zhejiang College of Construction,
Hangzhou 311231, P.R. China;

3. Center for Soft Machines and Smart Devices, Huanjiang Laboratory,
Zhuji, Zhejiang 311816, P.R. China)

Abstract: DNA-microcantilevers hold significant potential in biosensing due to their nanomechanical properties, yet the assumption regarding uniform curvature and axial strain of the neutral axis remains unverified. To address this, a functional potential energy model coupling the free energy of liquid crystalline DNA molecular layers with the composite beam deformation, was established. An innovative triangular series modal superposition approach was used to characterize displacement fields, and enable the variational solution via the Rayleigh-Ritz method, and a segmented integration strategy was employed to realize the full-domain free energy computation. Then the nonlinear equations governing Ritz coefficients were solved through the fixed-point iteration to

* 收稿日期: 2025-04-09; 修订日期: 2025-06-09

基金项目: 浙江省教育厅一般科研项目(Y202352719)

作者简介: 刘承(1985—),男,高级工程师,博士生(E-mail: liucheng777888@sina.com);

何小兵(1978—),男,教授,博士,博士生导师(通信作者. E-mail: david.hxb@gmail.com);

沈旭栋(1982—),男,助理研究员,博士(通信作者. E-mail: vibration@zju.edu.cn).

引用格式: 刘承,何小兵,沈旭栋. DNA-微悬臂梁的 Rayleigh-Ritz 法求解[J]. 应用数学和力学, 2026, 47(5): 577-588.

yield microcantilever deformations and DNA strand spacing distributions. The results indicate that, the deformed curvature exhibits pronounced uniformity, providing theoretical support for the uniformity assumption. Convergence analysis demonstrates that, the triangular series expansion order ≥ 10 and the number of beam segments divided $\geq 2\ 500$ ensure solution accuracy for deflection and stress, effectively validating the correctness of the uniformity assumption within the coupled model.

Key words: DNA-microcantilever; nano-mechanics; free energy; Rayleigh-Ritz

0 引 言

在 DNA-微悬臂梁的无标记生物检测实验中,研究人员观察到,生化反应(自由能产生 DNA 之间的相互排斥力)引发的表面应力变化可使微悬臂梁产生纳米级弯曲响应^[1-2],如图 1 所示.基于这一独特的纳米力学特性,各国科研团队研发的生化传感器具备器件微型化、纳米级检测精度、高灵敏响应、易于系统集成以及成本低等显著优势^[3].目前,该技术已广泛应用于基因序列识别^[4]、病毒标志物检测^[5]和环境监测^[6]等前沿领域,成为微纳传感与生物检测交叉学科的研究热点.

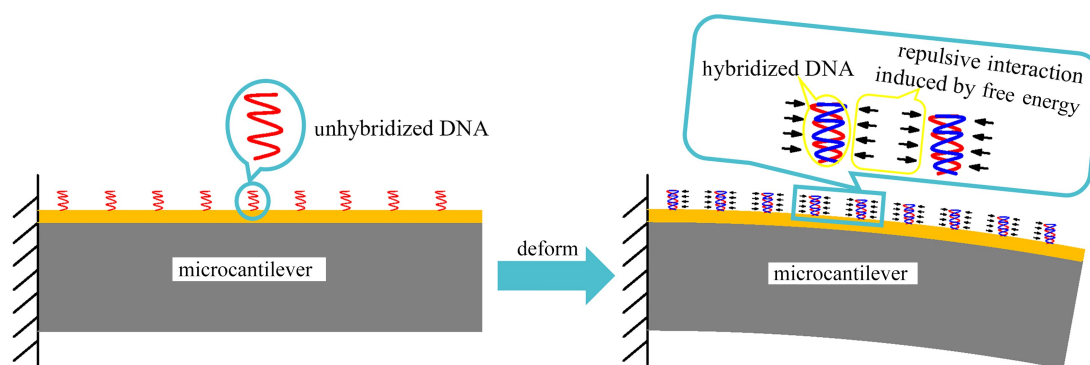


图 1 DNA 生化反应下的微悬臂梁的弯曲响应

Fig. 1 Bending responses of the microcantilever induced by DNA biochemical reactions

当前研究多集中于实验定性分析.已有实验表明,DNA-微悬臂梁的下挠与诸多因素有关,比如空间位阻抗^[7],缓冲溶液理化参数(pH 值、离子强度及浓度)^[8],DNA 分子本征属性(链长、封装密度及杂交效率)^[9],水环境特征(离子强度、类别和 pH 值)^[10],金层表面特性(电荷密度^[11]、粗糙度^[12]、清洁度^[13]及镀膜工艺^[14]),以及环境湿度^[15]等参数.然而,微悬臂梁变形后的曲率或 DNA 链间距分布尚缺乏实验验证.

为深入揭示微悬臂梁纳米力学行为的内在机理,需从分子作用层面出发,建立定量描述体系以精准预测其形变幅值及弯曲方向,有效衔接生物膜微观分子间的相互作用力与微悬臂梁宏观连续介质力学行为,从而突破当前实验观测与理论预测的割裂状态.Strey 等^[16-17]将 DNA 膜视作具有宏观弹性模量的聚合向列相液晶,膜的自由能主要来源于 DNA 链间的微观作用,包括静电力、水合力和构型熵,这些自由能促使悬臂梁响应.之后,Zhang 等^[18-19]建立了微悬臂的层合梁模型,利用最小势能原理求解 DNA 链间距和弹性模量对挠度的影响.李晶晶等^[20]对 DNA 自由能进行 Taylor 级数展开,获得其一阶的近似式,从而规避了求解多极值能量泛函的困难.王德鹏等^[21]求解了 DNA 不完全杂交情形下导致的微悬臂梁挠曲变形.Tan 等^[22]采用排除体积能和聚合物拉伸能作为 DNA 的自由能,通过最小势能原理求解梁的曲率和挠度.Yang 等^[23]在自由能的基础上进一步考虑 DNA 分子层的压电和挠曲电效应,采用 Poisson-Boltzmann 方程求解电势分布,再结合本构关系和力的平衡方程求解中性轴的轴向应变和曲率.上述理论模型均建立在一共同假设基础之上,即假设微悬臂梁中性轴沿其长度方向呈现均匀的曲率分布,且轴向应变保持恒定,但这一假设至今未有充分实验验证和理论支持.

后续研究中有学者并未使用这一假设.Wu 等^[24]通过计算 DNA 分子层的自由能和排斥能,确定其恒定的弹性模量和表面应力,将其纳入 DNA-微悬臂梁系统总能量后,运用变分原理推导出挠度控制微分方程并成功求解.之后他们将 DNA 分子层的自由能转化为均匀分布的恒定剪应力^[25],作为外荷载施加于悬臂梁上

表面.Tan 等^[26-27]将 DNA 分子层视作压电层,并考虑挠曲电效应,认为其与缓冲溶液中电荷密度变化导致了梁的弯曲,通过能量变分法导出了位移偏微分方程、电势 Poisson 方程及边界条件,并结合 Boltzmann 分布建立了电势-电荷密度耦合关系,最终构建出完整的电势场与位移场求解体系.上述理论在求解过程中存在两种简化路径:其一,将 DNA 自由能直接等效为恒定外力施加于悬臂梁表面,这种处理方式简化了计算流程,却忽略了 DNA 分子层与悬臂梁基体在变形过程中产生的动态耦合效应;其二,部分研究回避了复杂的 DNA 自由能计算,转而构建基于电荷密度分布的 Boltzmann 方程,但该方程在此领域的应用尚处于理论探索阶段,未得到实验验证.

本文突破传统理论假设——均匀的曲率和轴向应变分布,建立耦合的泛函势能模型,引入三角级数模态叠加法表征位移场进行 Rayleigh-Ritz 法变分求解,并结合分段积分策略实现全域自由能计算.采用不动点迭代算法求解关于 Ritz 系数的非线性方程组后,最终得到悬臂梁的挠度分布、中性轴轴向位移及应力等关键力学参数.该研究不仅建立了更精确的力学分析框架,更在理论层面揭示了曲率以及 DNA 链间距沿梁长的分布特性,为理解生物-材料作用机制提供了新的数值方法.

1 模 型

图 2 为 DNA-微悬臂梁,长度为 l , 宽度为 b , 顶层为 Au 梁,高度为 $2h_1$, 底层为 Si_3N_4 梁,高度为 $2h_2$, 中间的薄层为 Cr,作为粘贴层将顶层和底层连接在一起,厚度为 t .结合图 1 可知,Au 层之上为 DNA 分子层,其中的 DNA 分子在杂交过程中释放的生物自由能,将引发分子间排斥力,导致悬臂梁下挠,且无其他外加荷载. x 轴为换算截面的中性轴, O 点为中性轴的原点, o_{Au} 和 o_{Si} 分别为 Au 和 Si_3N_4 梁的形心,它们各自的局部坐标系以形心为原点,横坐标方向向下.

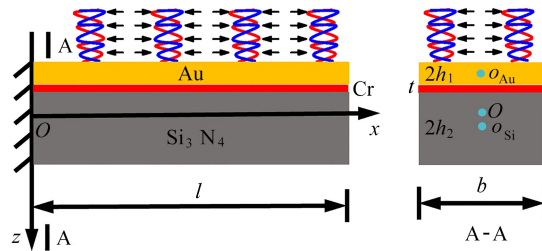


图 2 DNA-微悬臂梁示意图

Fig. 2 The DNA-microcantilever schematic

1.1 变形能

Au 梁上任意一点的纵向位移表示为

$$u_{\text{Au}} = u_{\text{Neu}} - z \frac{dw}{dx} = u_{\text{Neu}} - (z_{\text{Au}} - H_{\text{Au}}) \frac{dw}{dx}, \tag{1}$$

Si_3N_4 梁上任意一点的纵向位移表示为

$$u_{\text{Si}} = u_{\text{Neu}} - z \frac{dw}{dx} = u_{\text{Neu}} - (z_{\text{Si}} + H_{\text{Si}}) \frac{dw}{dx}, \tag{2}$$

其中 u_{Neu} 是组合梁换算截面中和轴处的位移, H_{Au} 和 H_{Si} 是组合梁换算截面中和轴位置分别到 Au 梁形心轴和 Si_3N_4 梁形心轴位置的距离, z_{Au} 和 z_{Si} 分别是 Au 梁形心和 Si_3N_4 梁形心为原点的局部坐标系的坐标值.

Au 梁和 Si_3N_4 梁的应变分别为

$$\varepsilon_{\text{Au}} = \frac{du_{\text{Neu}}}{dx} - (z_{\text{Au}} - H_{\text{Au}}) \frac{d^2w}{dx^2}, \tag{3}$$

$$\varepsilon_{\text{Si}} = \frac{du_{\text{Neu}}}{dx} - (z_{\text{Si}} + H_{\text{Si}}) \frac{d^2w}{dx^2}. \tag{4}$$

Au 梁和 Si_3N_4 梁的应变能分别为

$$\begin{aligned} \Pi_{\text{Au}} &= \frac{1}{2} \int_0^l \int_{-h_{\text{Au}}}^{h_{\text{Au}}} \sigma_{\text{Au}} \varepsilon_{\text{Au}} b dz dx = \\ &= \frac{1}{2} E_{\text{Au}} \int_0^l \left[(I_{\text{Au}} + A_{\text{Au}} H_{\text{Au}}^2) \left(\frac{d^2 w}{dx^2} \right)^2 + A_{\text{Au}} \left(\frac{du_{\text{Neu}}}{dx} \right)^2 + 2A_{\text{Au}} H_{\text{Au}} \frac{d^2 w}{dx^2} \frac{du_{\text{Neu}}}{dx} \right] dx, \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{\text{Si}} &= \frac{1}{2} \int_0^l \int_{-h_{\text{Si}}}^{h_{\text{Si}}} \sigma_{\text{Si}} \varepsilon_{\text{Si}} b dz dx = \\ &= \frac{1}{2} E_{\text{Si}} \int_0^l \left[(I_{\text{Si}} + A_{\text{Si}} H_{\text{Si}}^2) \left(\frac{d^2 w}{dx^2} \right)^2 + A_{\text{Si}} \left(\frac{du_{\text{Neu}}}{dx} \right)^2 + 2A_{\text{Si}} H_{\text{Si}} \frac{d^2 w}{dx^2} \frac{du_{\text{Neu}}}{dx} \right] dx, \end{aligned} \quad (6)$$

其中 E_{Au} 和 E_{Si} 分别为 Au 和 Si_3N_4 的弹性模量, $I_{\text{Au}} = \frac{1}{12} b(2h_{\text{Au}})^3$ 和 $I_{\text{Si}} = \frac{1}{12} b(2h_{\text{Si}})^3$ 为截面惯性矩, $A_{\text{Au}} = 2bh_{\text{Au}}$ 和 $A_{\text{Si}} = 2bh_{\text{Si}}$ 为面积.

1.2 DNA 生物自由能

DNA 的磷酸基团经水分子水解电离后使得 DNA 带负电荷,单位高度上的静电能为^[17]

$$W_e(d) = a_0 \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\exp(-d/\lambda_D)}{\sqrt{d/\lambda_D}}, \quad (7)$$

其中 d 为 DNA 链间距, $\lambda_D = 0.308/\sqrt{I}$ nm 为 Debye 屏蔽长度, I 为缓冲溶液浓度, a_0 为实验测得常数.

由于 DNA 分子对分子表面的水分子的氢键网络扰动,围绕已杂交的 DNA 链至少有 2 个水合壳,每个碱基对含有 20 个水分子,这使得 DNA 分子间具有水合排斥力.单位高度上的水合能与单位高度上的静电能具有相似的表达式^[17]:

$$W_h(d) = b_0 \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\exp(-d/\lambda_H)}{\sqrt{d/\lambda_H}}, \quad (8)$$

其中 λ_H 为水的关联长度, b_0 为实验测得常数.

从自由溶液到 DNA 膜底端,由于热波动引起构型熵的作用,构型熵的形式为^[17]

$$W_c(d) = c_0 k_B T k_c^{-1/4} \sqrt{\frac{\partial^2 (W_e + W_h)}{\partial d^2} - \frac{1}{d} \frac{\partial (W_e + W_h)}{\partial d}}, \quad (9)$$

其中 k_B 为 Boltzmann 常数, T 为温度, $k_c = k_B T l_p$ 为 DNA 圆柱体的弯曲刚度, $l_p = 50 + 0.032 4/I$ nm 为 DNA 分子的持续长度, c_0 为实验测得常数.

DNA 链单位长度的自由能为

$$W_u = W_e + W_h + W_c, \quad (10)$$

整个生物的自由能为

$$\Pi_{\text{DNA}} = bh_u \eta \int_0^l W_u dx, \quad (11)$$

b 和 h_u 分别是 DNA 分子层的宽度和高度, $h_u \approx N_n a_n$, N_n 是 DNA 核苷酸的数量, a_n 是核苷酸的长度.式(11)积分计算很困难,为此将悬臂梁纵向等分 n 段,每段长度为 Δl , 种植密度为 η , 第 j 段内的 DNA 间距、Au 层上表面的应变和单位长度的自由能分别为 d_j , $\varepsilon_{\text{DNA}j}$ 和 W_{uj} , 而 Π_{ej} , Π_{hj} 和 Π_{cj} 分别为该段内的静电能、水合能和熵能,则式(11)表示为

$$\Pi_{\text{DNA}} = bh_u \Delta l \eta \sum_{j=1}^n W_{uj} = \sum_{j=1}^n (\Pi_{ej} + \Pi_{hj} + \Pi_{cj}). \quad (12)$$

在该系统中,可以认为 DNA 分子层为轴向受力构件, $d_0 = 1/\sqrt{\eta}$ 为 DNA 链的初始间距,生物自由能释放过程中引起的悬臂梁下挠和应变,反过来又造成 DNA 的链间距发生改变,由 d_0 变为 d , 相互耦合直至平衡,结合式(3)有如下关系等式:

$$d = (1 + \varepsilon_{\text{DNA}}) d_0 = \left(1 + \frac{du_{\text{Neu}}}{dx} + (h_{\text{Au}} + H_{\text{Au}}) \frac{d^2 w}{dx^2} \right) d_0, \quad (13)$$

其中 ε_{DNA} 为 DNA 分子层的轴向应变,也就是 Au 层上表面的应变.由该等式可知,DNA 链的间距 d 跟曲率半径 $\rho = \left(\frac{d^2w}{dx^2}\right)^{-1}$ 和中性轴的轴向应变 $\frac{du_{\text{Neu}}}{dx}$ 有关,是关于梁纵向位置 x 的函数.

由于 Cr 层非常薄,可以忽略其刚度及其应变能,则整个系统的势能为

$$\Pi = \Pi_{\text{Au}} + \Pi_{\text{Si}} + \Pi_{\text{DNA}}. \tag{14}$$

1.3 Rayleigh-Ritz 法求解

对式(14)进行解析的变分求解非常困难,故采用数值求解方法,而悬臂梁的变形需满足如下边界条件:

$$w|_{x=0} = 0, \quad \frac{dw}{dx}\Big|_{x=0} = 0, \quad \frac{d^2w}{dx^2}\Big|_{x=l} = 0, \tag{15}$$

$$u_{\text{Neu}}|_{x=0} = 0, \quad \frac{du_{\text{Neu}}}{dx}\Big|_{x=l} = 0. \tag{16}$$

据此,假设挠度和中性轴处的位移表达式为以下级数展开:

$$w = \sum_{i=1}^m a_i \left[1 - \cos\left(\frac{(2i-1)\pi x}{2l}\right) \right], \tag{17}$$

$$u_{\text{Neu}} = \sum_{i=1}^m b_i \sin\left(\frac{(2i-1)\pi x}{2l}\right), \tag{18}$$

其中 a_i 和 b_i 为待定的 Ritz 系数.代入式(5)和式(6)中,得

$$\Pi_{\text{Au}} + \Pi_{\text{Si}} = \overline{EI} \sum_{i=1}^m \frac{\pi^4(2i-1)^4 a_i^2}{64l^3} + \overline{EA} \sum_{i=1}^m \frac{(2i-1)^2 \pi^2 b_i^2}{16l} + \overline{EAH} \sum_{i=1}^m \frac{(2i-1)^3 \pi^3 a_i b_i}{16l^2}, \tag{19}$$

具体推导见附录 A,其中 $\overline{EI} = E_{\text{Au}} I_{\text{Au}} + E_{\text{Au}} A_{\text{Au}} H_{\text{Au}}^2 + E_{\text{Si}} I_{\text{Si}} + E_{\text{Si}} A_{\text{Si}} H_{\text{Si}}^2$, $\overline{EA} = E_{\text{Au}} A_{\text{Au}} + E_{\text{Si}} A_{\text{Si}}$, $\overline{EAH} = E_{\text{Au}} A_{\text{Au}} H_{\text{Au}} + E_{\text{Si}} A_{\text{Si}} H_{\text{Si}}$, 则

$$\frac{\partial \Pi_{\text{Au}}}{\partial a_i} + \frac{\partial \Pi_{\text{Si}}}{\partial a_i} = A_{11} a_i + A_{12} b_i, \tag{20}$$

$$\frac{\partial \Pi_{\text{Au}}}{\partial b_i} + \frac{\partial \Pi_{\text{Si}}}{\partial b_i} = A_{21} a_i + A_{22} b_i, \tag{21}$$

其中

$$A_{11} = \frac{\overline{EI} \pi^4 (2i-1)^4}{32l^3}, \tag{22}$$

$$A_{22} = \frac{\overline{EA} (2i-1)^2 \pi^2}{8l}, \tag{23}$$

$$A_{12} = A_{21} = \frac{\overline{EAH} (2i-1)^3 \pi^3}{16l^2}. \tag{24}$$

将式(17)与式(18)代入式(13)后得

$$d_j = \left(1 + \sum_{i=1}^m \left[\frac{(2i-1)\pi b_i}{2l} \cos\left(\frac{(2i-1)\pi x_j}{2l}\right) \right] + (h_{\text{Au}} + H_{\text{Au}}) \sum_{i=1}^m \left[\frac{(2i-1)^2 \pi^2 a_i}{4l^2} \cos\left(\frac{(2i-1)\pi x_j}{2l}\right) \right] \right) d_0, \tag{25}$$

其中 x_j 为 j 梁段右节点的横坐标.再将式(17)与式(18)代入式(12)后,分别对 a_i 和 b_i 求导,并进行一定程度的整理得

$$\frac{\partial \Pi_e}{\partial a_i} = - \frac{d_0 (h_{\text{Au}} + H_{\text{Au}}) (2i-1)^2 \pi^2}{4l^2} \sum_{j=1}^n \left[\left(\frac{1}{\lambda_D} + \frac{1}{2d_j} \right) \cos\left(\frac{(2i-1)\pi x_j}{2l}\right) \Pi_{ej} \right], \tag{26}$$

$$\frac{\partial \Pi_h}{\partial a_i} = - \frac{d_0 (h_{\text{Au}} + H_{\text{Au}}) (2i-1)^2 \pi^2}{4l^2} \sum_{j=1}^n \left[\left(\frac{1}{\lambda_H} + \frac{1}{2d_j} \right) \cos\left(\frac{(2i-1)\pi x_j}{2l}\right) \Pi_{hj} \right], \tag{27}$$

$$\frac{\partial \Pi_c}{\partial a_i} = -\frac{c_0 k_B T k_c^{-1/4} b h_u \Delta l \eta d_0 (h_{Au} + H_{Au}) (2i-1)^2 \pi^2}{4 l^2} \times \sum_{j=1}^n \left\{ \cos\left(\frac{(2i-1)\pi x_j}{2l}\right) \left[W_{ej} \left(\frac{1}{\lambda_D^2} + \frac{2}{\lambda_D d_j} + \frac{5}{4d_j^2} \right) + W_{hj} \left(\frac{1}{\lambda_H^2} + \frac{2}{\lambda_H d_j} + \frac{5}{4d_j^2} \right) \right]^{-3/4} \times \left[W_{ej} \left(\frac{5}{2\lambda_D^2 d_j} + \frac{17}{4\lambda_D d_j^2} + \frac{25}{8d_j^3} + \frac{1}{\lambda_D^3} \right) + W_{hj} \left(\frac{5}{2\lambda_H^2 d_j} + \frac{17}{4\lambda_H d_j^2} + \frac{25}{8d_j^3} + \frac{1}{\lambda_H^3} \right) \right] \right\}, \quad (28)$$

$$\frac{\partial \Pi_e}{\partial b_i} = -\frac{d_0 (2i-1) \pi}{2l} \sum_{j=1}^n \left[\left(\frac{1}{\lambda_D} + \frac{1}{2d_j} \right) \cos\left(\frac{(2i-1)\pi x_j}{2l}\right) \Pi_{ej} \right], \quad (29)$$

$$\frac{\partial \Pi_h}{\partial b_i} = -\frac{d_0 (2i-1) \pi}{2l} \sum_{j=1}^n \left[\left(\frac{1}{\lambda_H} + \frac{1}{2d_j} \right) \cos\left(\frac{(2i-1)\pi x_j}{2l}\right) \Pi_{hj} \right], \quad (30)$$

$$\frac{\partial \Pi_c}{\partial b_i} = -\frac{c_0 k_B T k_c^{-1/4} b h_u \Delta l \eta d_0 (2i-1) \pi}{4 l} \times \sum_{j=1}^n \left\{ \cos\left(\frac{(2i-1)\pi x_j}{2l}\right) \left[W_{ej} \left(\frac{1}{\lambda_D^2} + \frac{2}{\lambda_D d_j} + \frac{5}{4d_j^2} \right) + W_{hj} \left(\frac{1}{\lambda_H^2} + \frac{2}{\lambda_H d_j} + \frac{5}{4d_j^2} \right) \right]^{-3/4} \times \left[W_{ej} \left(\frac{5}{2\lambda_D^2 d_j} + \frac{17}{4\lambda_D d_j^2} + \frac{25}{8d_j^3} + \frac{1}{\lambda_D^3} \right) + W_{hj} \left(\frac{5}{2\lambda_H^2 d_j} + \frac{17}{4\lambda_H d_j^2} + \frac{25}{8d_j^3} + \frac{1}{\lambda_H^3} \right) \right] \right\}. \quad (31)$$

根据最小势能原理, 即 $\frac{\partial \Pi}{\partial a_i} = 0, \frac{\partial \Pi}{\partial b_i} = 0$, 可以得

$$a_i = \frac{B_1 A_{22} - B_2 A_{12}}{A_{11} A_{22} - A_{12} A_{21}}, \quad (32)$$

$$b_i = \frac{B_2 A_{11} - B_1 A_{21}}{A_{11} A_{22} - A_{12} A_{21}}, \quad (33)$$

其中 B_1 和 B_2 详见附录 A.

利用式(32)和式(33)进行不动点迭代, 求解得到 a_i 和 b_i , 从而可以得到 DNA 悬臂梁的挠度 w 、变形后各处 DNA 链的间距 d 和应力 ε_{DNA} 等, 一般会采用微悬臂梁的表面应力 σ 来表征其反应, 它与曲率半径 ρ 的关系遵循经典的 Stoney 公式如下^[28]:

$$\sigma = \frac{E_{Si} (2h_{Si})^2}{6(1-\nu)\rho}, \quad (34)$$

其中 ν 为 Si_3N_4 的 Poisson 比.

2 数值算例

DNA-微悬臂梁的各参数取值为^[17,20]: $l = 200 \mu\text{m}, b = 40 \mu\text{m}, 2h_{Si} = 0.5 \mu\text{m}, 2h_{Au} = 25 \text{ nm}, 2h_{Cr} = 5 \text{ nm}; E_{Si} = 85 \text{ GPa}, E_{Au} = 73 \text{ GPa}, E_{Cr} = 108 \text{ GPa}, \nu = 0.25; a_0 = 0 \text{ J/m}, b_0 = 1.7 \times 10^{-7} \text{ J/m}, c_0 = 1.2, \lambda_D = 0.308 \text{ nm}, \lambda_H = 0.29 \text{ nm}, a_n = 0.34 \text{ nm}, N_n = 10 \text{ nt}, T = 298 \text{ K}, k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K}, l_p = 50 \text{ nm}, \eta = 0.06 \text{ chains/nm}^2$.

首先分析级数的阶数 m 和划分梁段数 n 对计算结果的影响, 以及 DNA 微悬臂梁的受力特征. 图 3 中, $n = 5000$ 保持不变, 当 $m = 3, 10, 30$ 和 100 时, 展示了挠度 w , 中性轴处的轴向位移 u_{Neu} , 表面应力 σ 沿着横轴 x 的分布情况. 从图中可知, 挠度 w 和中性轴处的轴向位移 u_{Neu} 对阶数 m 不敏感, 尤其是挠度 $w, m = 3$ 与 $m = 100$ 时的分布及数值几乎无差异. 表面应力 σ 则较为敏感, 例如 $m = 100$ 时, 除了靠近自由端的极小范围内应力骤降至 0 外, 其余部分虽呈三角函数周期性波动, 但周期和幅值极小, 近乎平稳直线 ($\sigma \approx 1.121 \times 10^{-6} \text{ N/mm}$); 而 $m = 3$ 时, 应力在 $x = 130 \mu\text{m}$ 处开始从波峰降至自由端的 0, 其余部分呈半波形状, 幅值在 $(1.012 \sim 1.35) \times 10^{-6} \text{ N/mm}$ 范围内, 失真明显; 随着 m 的增加, 情况有所改善, $m = 10$ 时, 除自由端附近外, 其余部分的应力已能满足工程精度. 因采用级数逼近拟合位移, 应力作为位移的二阶求导, 连续性将变差, 故需要更高的级数阶数以保证真实性, 这样也导致了表面应力对阶数的敏感性.

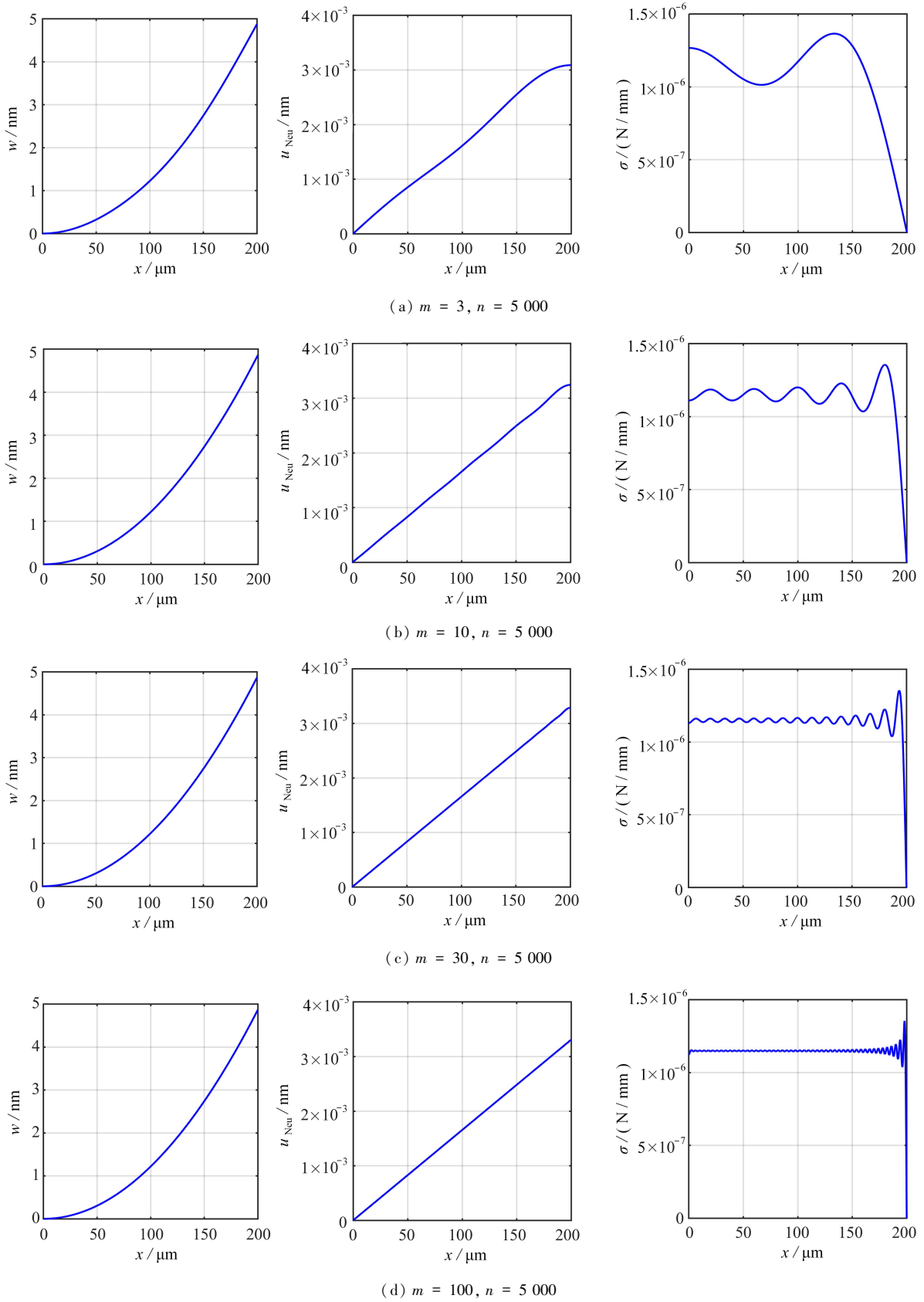
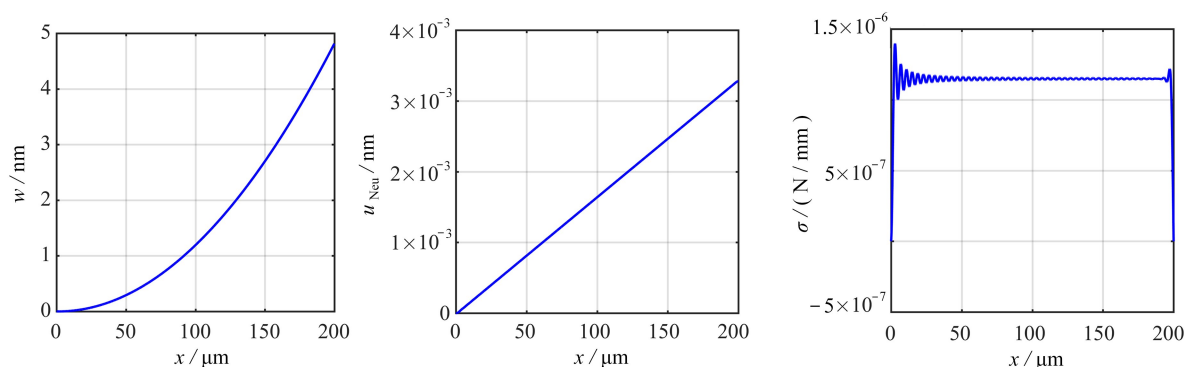
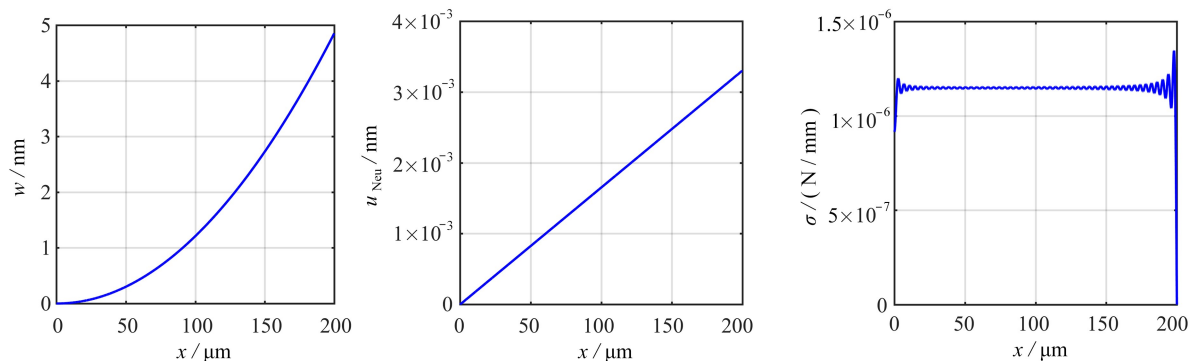
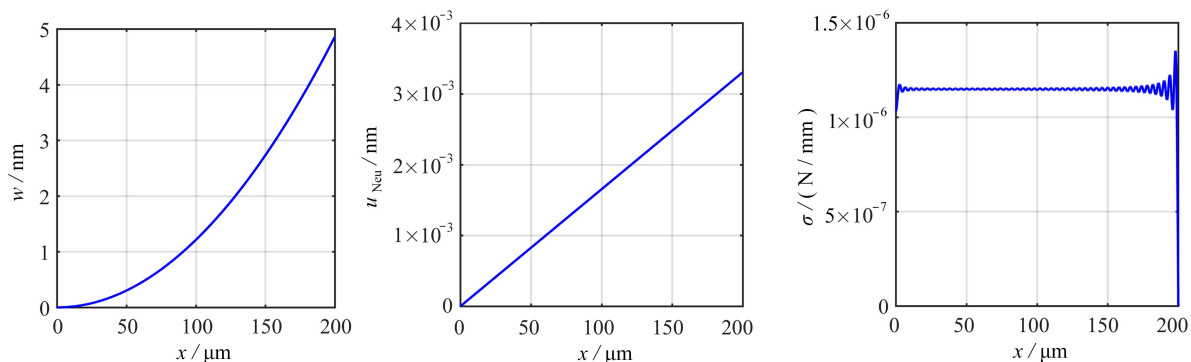


图 3 级数的阶数 m 对挠度 w , 中性轴位移 u_{Neu} 和表面应力 σ 沿 x 轴的分布影响

Fig. 3 Effects of series' order m on the distributions along the x -axis of deflection w , neutral axis displacement u_{Neu} and surface stress σ

图4展示了 $m = 100$ 时, $n = 100, 500, 1\,000$ 和 $2\,500$ 四种情况下, 挠度 w , 中性轴处的轴向位移 u_{Neu} , 表面应力 σ 沿着横轴 x 的分布. 结合图3(d)可知, 挠度 w 和中性轴处的轴向位移 u_{Neu} 对划分梁段数目 n 不敏感. 表面应力 σ 对 n 的敏感性主要体现在固支端附近: $n = 100$ 时, 应力在固支端极小范围内由 1.4×10^{-6} N/mm 骤降至 0, 结果失真; $n = 500$ 时, 固支端应力为 9.15×10^{-7} N/mm, 在极小的范围内升至波峰 1.2×10^{-6} N/mm, 相比于 $n = 100$ 的结果, 有所改善; $n = 1\,000$ 时, 固支端处应力为 1.03×10^{-6} N/mm, 与之最近的波峰为 1.174×10^{-6} N/mm, 差距继续缩小; $n = 2\,500$ 时, 两者分别为 1.098×10^{-6} N/mm 和 1.159×10^{-6} N/mm, 趋于均匀. 为精确计算应力, 尤其是避免固支端应力失真, 需要将 $200 \mu\text{m}$ 的梁段划分成 $2\,500$ 等分, 远超传统有限元单元数目, 原因有二: 一是按式(11)积分生物自由能时, 指数函数的强非线性需在极小的梁段内视为恒定单位自由能; 二是根据式(13), DNA 链的间距 d 与应变 ε_{DNA} 成线性正比, 小变形下应变值约为 10^{-4} 这个数量级, 故 d 和 d_0 差异微小, 需细分梁段才能捕捉该微小差异.

(a) $m = 100, n = 100$ (b) $m = 100, n = 500$ (c) $m = 100, n = 1\,000$

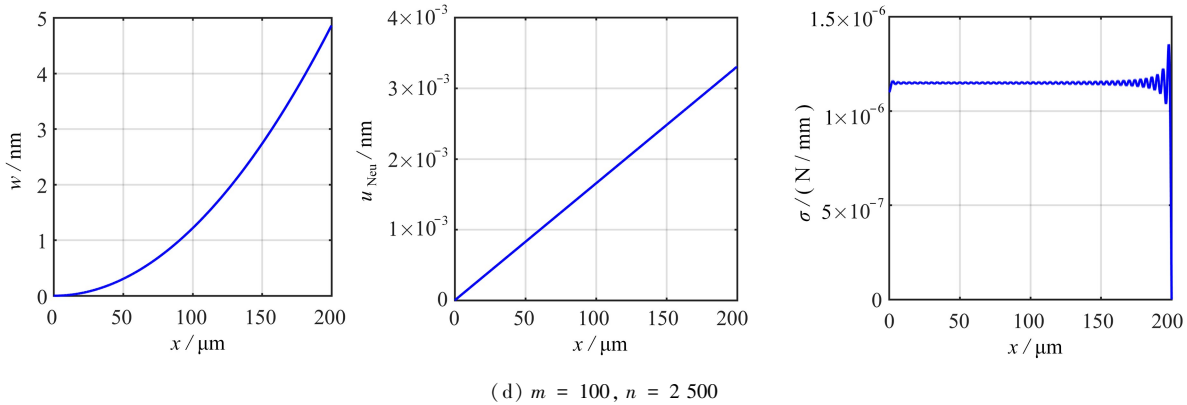


图 4 梁段划分数量 n 对挠度 w , 中性轴位移 u_{Neu} 和表面应力 σ 沿 x 轴的分布影响

Fig. 4 Effects of the number of divided beam segments, n , on the distributions along the x -axis of deflection w , neutral axis displacement u_{Neu} and surface stress σ

从图 3(d) 中可知, 挠度 w 沿着 x 轴近似呈二次抛物线增长, 右端下挠为 4.86 nm; 中性轴处位移 u_{Neu} 沿着 x 轴线性增加, 右端处位移仅为 3.3×10^{-3} nm, 远小于下挠量; 结合式 (34) 和表面应力 σ 的曲线可知, 曲率 d^2w/dx^2 沿着 x 轴保持恒定. 因此, DNA-微悬臂梁受力近似于在自由端附近受纯弯矩作用的构件. 这一结论为文献中关于 x 轴方向等曲率假设或变形后 DNA 链等间距假设提供了有力理论支撑.

在 $m = 100, n = 5\,000$, 其他参数保持不变的情况下, 图 5(a)、5(b) 展示了 DNA 核苷酸的数量 N_n 对下挠量和表面应力的影响, 并与文献 [20] 的结果进行了对比, 两者挠度值相近, 表面应力值随着核苷酸数量的增加而有所偏差. 原因在于, 该文献通过一阶 Taylor 级数展开来近似简化生物自由能, 未能充分反映 10^{-4} 量级应变对生物自由能的影响. 此外, 图中显示, 随着核苷酸数量的增加, 下挠量与表面应力均呈上升趋势.

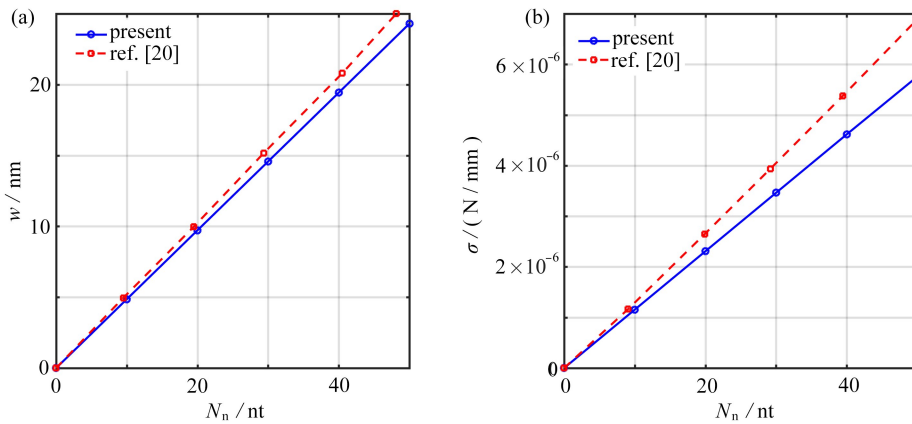


图 5 挠度与表面应力随核苷酸数量的变化曲线

Fig. 5 Deflections and surface stresses vs. the number of nucleotides

在核苷酸数量 $N_n = 10$ nt, 其他参数不变的条件下, 图 6 展示了种植密度 η 对表面应力的影响, 并与 Stachowiak^[9] 的实验数据进行了对比, 结果显示两者吻合度较高. 此外, 该图还表明 DNA 的种植密度与表面应力呈指数关联.

杂交成功率通常仅为 60%~80%^[21, 29-30], 导致杂交密度 η' 低于种植密度 η , 因而微悬臂梁无法达到理论下挠值. 基于 DNA-微悬臂梁的下挠机理, 可准确判定最终的杂交密度 η' . 杂交反应在浓度为 0.1 mol/L 的缓冲溶液中进行时, 取 $a_0 = 4.1 \times 10^{-10}$ J/m, $b_0 = 1.1 \times 10^{-7}$ J/m, $c_0 = 0.8, \lambda_D = 0.976$ nm, $\lambda_H = 0.288$ nm^[17, 21]; 氮化硅的弹性模量 $E_{\text{Si}} = 180$ GPa^[17, 21], 其他参数与文献 [20] 一致. 图 7 展示了不同种植密度下, 挠度随着核苷酸数量的变化曲线, 并与 Wu 等^[29] 在 $\eta = 0.06$ chains/nm², $N_n = 20$ nt, 30 nt 时的实验数据进行对比. 图中可见, 挠度对种植密度非常敏感, 适合用于判定最终的杂交率或杂交密度. 此外, 受杂交成功率的影响, Wu 等的实验数据并未达到 $\eta = 0.06$ chains/nm² 对应的理论挠度, 实际值介于 $\eta = 0.04 \sim 0.05$ chains/nm² 之间. 经网格

插值求得 $N_n = 20$ nt 时的 $\eta' = 0.0437$, $N_n = 30$ nt 时的 $\eta' = 0.0428$, 此结果与文献[21]的结论一致。

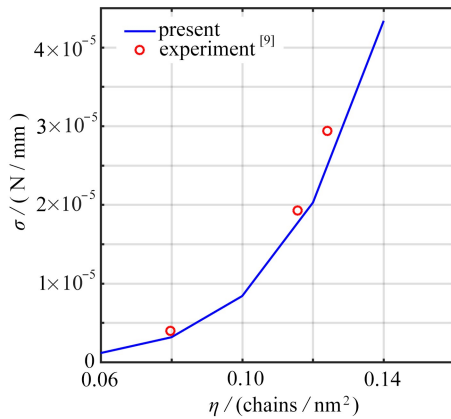


图6 表面应力随种植密度的变化曲线

Fig. 6 Surface stresses vs. the grafting density

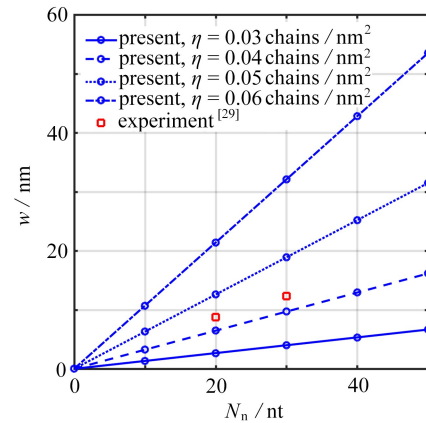


图7 在各种种植密度下,挠度随核苷酸数量的变化曲线

Fig. 7 Deflections vs. the number of nucleotides at different grafting densities

3 结 论

本文构建了 DNA-微悬臂梁的多物理场耦合能量的泛函模型,创新性地利用三角级数参数化逼近悬臂梁挠度曲线及中性轴位移场进行 Rayleigh-Ritz 法求解.计算中提出分段积分策略实现生物自由能全域计算,采用不动点迭代法求解关于 Ritz 系数的非线性方程组,最终精确重构了悬臂梁变形及 DNA 链间距的分布特性.基于该模型开展系统参数分析得出了以下结论:

1) 数值离散精度控制准则.研究揭示,级数展开阶数与梁体离散单元数对挠度和轴向位移计算精度影响较小,但对应力及 DNA 链间距分布的求解精度影响显著,尤其在固支端附近区域.当离散单元数不足时,固支端应力失真严重.建议工程计算中,级数展开阶数不低于 10 阶,梁体离散单元数不少于 2 500 段,以确保应力求解精度.

2) 梁体变形模式简化依据.在 DNA 生物自由能作用下,中性轴轴向位移可忽略,并且曲率或 DNA 链间距沿梁长均匀分布,此时生物自由能可等效为作用在梁自由端附近的集中弯矩,从理论上证实了传统等曲率假设的合理性.

3) 参数量化规律.计算结果与文献理论预测及实验数据吻合,定量分析表明:悬臂梁自由端挠度与表面应力随 DNA 链长度呈线性正相关,而随着分子种植密度增加,二者表现出指数增长特性.并可通过对比实测挠度与理论值,准确判定杂交密度.

附 录 A

$$\begin{aligned}
 \Pi_{Au} + \Pi_{Si} &= \frac{1}{2} \overline{EI} \int_0^l \left[\sum_{i=1}^m a_i \left[\left(\frac{(2i-1)\pi}{2l} \right)^2 \cos\left(\frac{(2i-1)\pi x}{2l} \right) \right] \right]^2 dx + \\
 &\frac{1}{2} \overline{EA} \int_0^l \left[\sum_{i=1}^m b_i \left[\frac{(2i-1)\pi}{2l} \cos\left(\frac{(2i-1)\pi x}{2l} \right) \right] \right]^2 dx + \\
 &\overline{EAH} \int_0^l \sum_{i=1}^m a_i \left[\left(\frac{(2i-1)\pi}{2l} \right)^2 \cos\left(\frac{(2i-1)\pi x}{2l} \right) \right] \times \sum_{i=1}^m b_i \left[\frac{(2i-1)\pi}{2l} \cos\left(\frac{(2i-1)\pi x}{2l} \right) \right] dx \approx \\
 &\frac{1}{2} \overline{EI} \int_0^l \sum_{i=1}^m \frac{\pi^4 (2i-1)^4 a_i^2}{16l^4} \cos^2\left(\frac{(2i-1)\pi x}{2l} \right) dx + \\
 &\frac{1}{2} \overline{EA} \int_0^l \sum_{i=1}^m \frac{(2i-1)^2 \pi^2 b_i^2}{4l^2} \cos^2\left(\frac{(2i-1)\pi x}{2l} \right) dx + \\
 &\overline{EAH} \int_0^l \sum_{i=1}^m \frac{(2i-1)^3 \pi^3 a_i b_i}{8l^3} \cos^2\left(\frac{(2i-1)\pi x}{2l} \right) dx =
 \end{aligned}$$

$$\frac{EI}{l} \sum_{i=1}^m \frac{\pi^4 (2i-1)^4 a_i^2}{64l^3} + EA \sum_{i=1}^m \frac{(2i-1)^2 \pi^2 b_i^2}{16l} + EAH \sum_{i=1}^m \frac{(2i-1)^3 \pi^3 a_i b_i}{16l^2}, \quad (A1)$$

$$B_1 = \frac{d_0(h_{Au} + H_{Au})}{4l^2} \sum_{j=1}^n \left[\left(\frac{1}{\lambda_D} + \frac{1}{2d_j} \right) \cos\left(\frac{(2i-1)\pi x_j}{2l}\right) \Pi_{ej} \right] +$$

$$\frac{d_0(h_{Au} + H_{Au})}{4l^2} \sum_{j=1}^n \left[\left(\frac{1}{\lambda_H} + \frac{1}{2d_j} \right) \cos\left(\frac{(2i-1)\pi x_j}{2l}\right) \Pi_{hj} \right] +$$

$$\frac{c_0 k_B T k_c^{-1/4} b h_u \Delta l \eta}{4} \frac{d_0(h_{Au} + H_{Au})}{4l^2} (2i-1)^2 \pi^2 \times$$

$$\sum_{j=1}^n \left\{ \cos\left(\frac{(2i-1)\pi x_j}{2l}\right) \left[W_{ej} \left(\frac{1}{\lambda_D^2} + \frac{2}{\lambda_D d_j} + \frac{5}{4d_j^2} \right) + W_{hj} \left(\frac{1}{\lambda_H^2} + \frac{2}{\lambda_H d_j} + \frac{5}{4d_j^2} \right) \right]^{-3/4} \times \right.$$

$$\left. \left[W_{ej} \left(\frac{5}{2\lambda_D^2 d_j} + \frac{17}{4\lambda_D d_j^2} + \frac{25}{8d_j^3} + \frac{1}{\lambda_D^3} \right) + W_{hj} \left(\frac{5}{2\lambda_H^2 d_j} + \frac{17}{4\lambda_H d_j^2} + \frac{25}{8d_j^3} + \frac{1}{\lambda_H^3} \right) \right] \right\}, \quad (A2)$$

$$B_2 = \frac{d_0(2i-1)\pi}{2l} \sum_{j=1}^n \left[\left(\frac{1}{\lambda_D} + \frac{1}{2d_j} \right) \cos\left(\frac{(2i-1)\pi x_j}{2l}\right) \Pi_{ej} \right] +$$

$$\frac{d_0(2i-1)\pi}{2l} \sum_{j=1}^n \left[\left(\frac{1}{\lambda_H} + \frac{1}{2d_j} \right) \cos\left(\frac{(2i-1)\pi x_j}{2l}\right) \Pi_{hj} \right] +$$

$$\frac{c_0 k_B T k_c^{-1/4} b h_u \Delta l \eta}{4} \frac{d_0(2i-1)\pi}{2l} \times$$

$$\sum_{j=1}^n \left\{ \cos\left(\frac{(2i-1)\pi x_j}{2l}\right) \left[W_{ej} \left(\frac{1}{\lambda_D^2} + \frac{2}{\lambda_D d_j} + \frac{5}{4d_j^2} \right) + W_{hj} \left(\frac{1}{\lambda_H^2} + \frac{2}{\lambda_H d_j} + \frac{5}{4d_j^2} \right) \right]^{-3/4} \times \right.$$

$$\left. \left[W_{ej} \left(\frac{5}{2\lambda_D^2 d_j} + \frac{17}{4\lambda_D d_j^2} + \frac{25}{8d_j^3} + \frac{1}{\lambda_D^3} \right) + W_{hj} \left(\frac{5}{2\lambda_H^2 d_j} + \frac{17}{4\lambda_H d_j^2} + \frac{25}{8d_j^3} + \frac{1}{\lambda_H^3} \right) \right] \right\}. \quad (A3)$$

参考文献 (References):

- [1] FRITZ J, BALLER M K, LANG H P, et al. Translating biomolecular recognition into nanomechanics[J]. *Science*, 2000, **288**(5464): 316-318.
- [2] MUNTEANU S, GAM-DEROUICH S, FLAMMIER C, et al. Scanning electrochemical microscopy monitoring in microcantilever platforms[J]. *Analytical Chemistry*, 2012, **84**(17): 7449-7455.
- [3] YUE M, LIN H, DEDRICK D E, et al. A 2-D microcantilever array for multiplexed biomolecular analysis[J]. *Journal of Microelectromechanical Systems*, 2004, **13**(2): 290-299.
- [4] ÁLVAREZ M, CARRASCOSA L G, MORENO M, et al. Nanomechanics of the formation of DNA self-assembled monolayers and hybridization on microcantilevers[J]. *Langmuir*, 2004, **20**(22): 9663-9668.
- [5] ILIC B, YANG Y, CRAIGHEAD H G. Virus detection using nanoelectromechanical devices[J]. *Applied Physics Letters*, 2004, **85**(13): 2604-2606.
- [6] TAN Z Q, ZHANG N H, MENG W L, et al. Mechanism for invalid detection of microcantilever-DNA biosensors due to environmental changes[J]. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2016, **49**(22): 225402.
- [7] MCKENDRY R, ZHANG J, ARNTZ Y, et al. Multiple label-free biodetection and quantitative DNA-binding assays on a nanomechanical cantilever array[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2002, **99**(15): 9783-9788.
- [8] FRITZ J, BALLER M K, LANG H P, et al. Stress at the solid-liquid interface of self-assembled monolayers on gold investigated with a nanomechanical sensor[J]. *Langmuir*, 2000, **16**(25): 9694-9696.
- [9] STACHOWIAK J C, YUE M, CASTELINO K, et al. Chemomechanics of surface stresses induced by DNA hybridization[J]. *Langmuir*, 2006, **22**(1): 263-268.
- [10] WATARI M, GALBRAITH J, LANG H P, et al. Investigating the molecular mechanisms of in-plane mechanochemistry on cantilever arrays[J]. *Journal of the American Chemical Society*, 2007, **129**(3): 601-609.
- [11] GODIN M, TABARD-COSSA V, MIYAHARA Y, et al. Cantilever-based sensing: the origin of surface stress and optimization strategies[J]. *Nanotechnology*, 2010, **21**(7): 075501.
- [12] MERTENS J, CALLEJA M, RAMOS D, et al. Role of the gold film nanostructure on the nanomechanical re-

- sponse of microcantilever sensors[J]. *Journal of Applied Physics*, 2007, **101**(3): 034904.
- [13] TABARD-COSSA V, GODIN M, BURGESS I J, et al. Microcantilever-based sensors: effect of morphology, adhesion, and cleanliness of the sensing surface on surface stress[J]. *Analytical Chemistry*, 2007, **79**(21): 8136-8143.
- [14] ARROYO-HERNÁNDEZ M, TAMAYO J, COSTA-KRÄMER J L. Stress and DNA assembly differences on cantilevers gold coated by resistive and E-beam evaporation techniques[J]. *Langmuir*, 2009, **25**(18): 10633-10638.
- [15] DOMÍNGUEZ C M, KOSAKA P M, MOKRY G, et al. Hydration induced stress on DNA monolayers grafted on microcantilevers[J]. *Langmuir*, 2014, **30**(36): 10962-10969.
- [16] STREY H H, PARSEGLIAN V A, PODGORNIK R. Equation of state for DNA liquid crystals: fluctuation enhanced electrostatic double layer repulsion[J]. *Physical Review Letters*, 1997, **78**(5): 895-898.
- [17] STREY H H, PARSEGLIAN V A, PODGORNIK R. Equation of state for polymer liquid crystals: theory and experiment[J]. *Physical Review E*, 1999, **59**(1): 999-1008.
- [18] ZHANG N H, SHAN J Y. An energy model for nanomechanical deflection of cantilever-DNA chip[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2008, **56**(6): 2328-2337.
- [19] 张能辉, 单金英. 基因芯片纳米力学行为的能量模型[J]. 力学季刊, 2007, **28**(1): 54-57. (ZHANG Nenghui, SHAN Jinying. An energy model for nanomechanical behavior of gene chip[J]. *Chinese Quarterly of Mechanics*, 2007, **28**(1): 54-57. (in Chinese))
- [20] 李晶晶, 谭邹卿, 张能辉. 基因芯片纳米挠度和表面应力的解析预测[J]. 力学季刊, 2010, **31**(1): 113-117. (LI Jingjing, TAN Zouqing, ZHANG Nenghui. An analytical prediction for nanomechanical deflection and surface stress of gene chip[J]. *Chinese Quarterly of Mechanics*, 2010, **31**(1): 113-117. (in Chinese))
- [21] 王德鹏, 王记增. 可识别单一核苷酸错配的微悬臂基因检测技术力学模型[J]. 兰州大学学报(自然科学版), 2017, **53**(4): 558-568. (WANG Depeng, WANG Jizeng. A mechanic model for the micro-cantilever-based gene detection of single nucleotide mismatches[J]. *Journal of Lanzhou University (Natural Sciences)*, 2017, **53**(4): 558-568. (in Chinese))
- [22] TAN Z Q, CHEN Y C, ZHANG N H. Theoretical analysis for bending of single-stranded DNA adsorption on microcantilever sensors[J]. *Sensors*, 2018, **18**(9): 2812.
- [23] YANG Y, ZHANG N, LIU H, et al. Piezoelectric and flexoelectric effects of DNA adsorbed films on microcantilevers[J]. *Applied Mathematics and Mechanics (English Edition)*, 2023, **44**(9): 1547-1562.
- [24] WU J, ZHANG Y, ZHANG N. Anomalous elastic properties of attraction-dominated DNA self-assembled 2D films and the resultant dynamic biodetection signals of microbeam sensors[J]. *Nanomaterials*, 2019, **9**(4): 543.
- [25] WU J, ZHANG N. Clamped-end effect on static detection signals of DNA-microcantilever[J]. *Applied Mathematics and Mechanics (English Edition)*, 2021, **42**(10): 1423-1438.
- [26] TAN Z, FENG Y, SHI X, et al. A mechano-electro-chemical coupling model for bending analysis of single-stranded DNA microbeam biosensors due to flexoelectricity[J]. *Journal of Applied Mechanics*, 2024, **91**(4): 041003.
- [27] TAN Z, FENG Y, SHI X, et al. A unified model for mechanical deformations of single stranded DNA-microbeam biosensors considering surface charge effects[J]. *Applied Mathematical Modelling*, 2024, **135**: 559-577.
- [28] MIYATANI T, FUJIHIRA M. Calibration of surface stress measurements with atomic force microscopy[J]. *Journal of Applied Physics*, 1997, **81**(11): 7099-7115.
- [29] WU G, JI H, HANSEN K, et al. Origin of nanomechanical cantilever motion generated from biomolecular interactions[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2001, **98**(4): 1560-1564.
- [30] PETERLINZ K A, GEORGIADIS R M, HERNE T M, et al. Observation of hybridization and dehybridization of thiol-tethered DNA using two-color surface plasmon resonance spectroscopy[J]. *Journal of the American Chemical Society*, 1997, **119**(14): 3401-3402.