

# 自坍塌碳纳米管间的黏附\*

张存 陈磊 陈少华<sup>†</sup>

(中国科学院力学研究所, 北京, 100190)

**摘要** 本文利用弹性力学预测了初始直径相同的两根自坍塌单壁碳纳米管的粘附问题, 并应用不完全椭圆积分给出了自坍塌碳纳米管黏附的几何构型, 与分子力学模拟结果一致。相对于圆形及小变形碳纳米管间的黏附, 自坍塌碳纳米管间的黏附接触面积更大, 界面黏附强度更强, 可有效提高碳纳米管束增强复合材料中复合增强相内部的界面粘结性能。

**关键词:** 碳纳米管, 自坍塌, 自粘附, 几何构型

## 一、引言

碳纳米管(CNT), 作为一种特殊的材料, 自从 Ijima 发现以来, 其力学、化学和物理等性能引起了人们广泛的研究兴趣, 并发现 CNT 在纳米机电系统(NEMS)、多功能复合材料、超级电容等方面具有很大的应用前景。

对于单壁碳纳米管(SWNT), 当其直径比较小时, 其截面形状一般为圆形; 随着其直径的增大, SWNT 在外界扰动影响下极易失稳, 而发生自坍塌。在 CNT 阵列的制备过程中, 由于范德华力的影响, 相邻 CNT 间极易发生自黏附现象。CNT 间的自黏附一方面不利于规则碳纳米管阵列的生成, 另一方面又对纳米管束的形成具有决定性的意义。如何描述 CNT 间的黏附行为成为很多科研工作者关心的问题。为了简便, 在一些研究中 SWNT 被直接假设为刚体圆柱壳模型<sup>[1]</sup>, 而已有理论及分子动力学研究表明, 当 SWNT 直径达到 20Å 后, 径向变形的影响已不容忽略。Tang 等人<sup>[2]</sup>利用弹性理论研究了径向小变形条件下 SWNT 的黏附问题, 但其模型对于自坍塌 SWNT 的黏附不再适用。最近, Zhang 等人<sup>[3]</sup>直接制备出了坍塌 CNT 含量达到 50% 的阵列。SWNT 发生自坍塌后, 其自身管壁间黏附亦会对自坍塌 SWNT 间的黏附造成很大影响, 如何刻画其黏附结构的形状以及结构界面黏附强度的影响因素, 需要建立一个新的模型。

基于最小势能原理, 本文利用变分方法建立了相邻坍塌 SWNT 间黏附的控制方程及相应的边界条件, 给出了描述两个坍塌 SWNT 黏附几何构型的方程, 理论分析了坍塌构型、黏附尺寸及界面黏附强度的影响因素。进一步开展了分子力学模拟研究, 理论预测与分子力学计算结果一致。

## 二、弹性模型及精确解

如图(1a)所示, 两根初始直径相同的坍塌 SWNT 相互接触, 其自黏附长度为  $2a$ , 管间黏附长度为  $2b$ 。黏附平板间距分别为  $d_1, d_2$ 。由于系统的对称性, 我们只分析如图(1b)

\*国家自然科学基金: (10972220、11125211、11021262)及国家重大科学研究计划 (2012CB937500)

<sup>†</sup>报告人简介: 通讯作者: 电话: +86-10-82543960; 传真: +86 10 82543977.

电子邮件: [chenshaohua72@hotmail.com](mailto:chenshaohua72@hotmail.com) (陈少华).

