

# 碳管黏附石墨烯系统的弯曲及恢复性能\*

王帅<sup>1</sup> 王超<sup>2</sup> 陈少华<sup>1</sup>

<sup>1</sup> (北京理工大学先进结构技术研究院, 100081)

<sup>2</sup> (中国科学院力学研究所非线性力学国家重点实验室, 100190)

**摘要** 实验表明碳管黏附石墨烯泡沫材料具有明显优于石墨烯泡沫材料的压缩性能, 这得益于黏附与石墨烯表面的碳管对石墨烯弯曲性能的增强作用。本文采用分子动力学方法研究了碳管黏附石墨烯系统的三点弯曲性能及恢复机制。研究表明, 碳管黏附石墨烯系统的弯曲性能明显强于纯石墨烯系统, 且碳管黏附石墨烯系统在压缩-释放后, 其最终挠度也明显小于石墨烯, 即其恢复能力也较强, 这主要得益于碳管明显增强了石墨烯的弯曲刚度。进而研究了在不同压入深度下碳管黏附石墨烯系统的最终挠度, 研究发现随着压入深度的增多, 其恢复能力明显减小, 最终位移逐渐增加, 这主要是由于碳管和石墨烯之间、石墨烯和固定端之间出现了不可逆的滑动。

**关键词:** 碳管, 石墨烯, 增强机理, 三点弯曲。

## 一、引言

由碳管和石墨烯组成的复合泡沫材料的力学性能明显优于纯石墨烯泡沫材料的力学<sup>[1]</sup>, 这得益于碳管对碳管黏附石墨烯系统的增强作用, 然而目前尚不清楚碳管是如何影响其碳管黏附石墨烯系统的力学性能的。

近年来, 粗粒化分子动力学在揭示碳管和石墨烯力学性能方面展现出了巨大优势, 本文采用粗粒化分子动力学方法, 揭示了碳管增强石墨烯弯曲性能的微观机理。

## 二、正文

### 3.1 模型及势函数

碳管随机的黏附在单片石墨烯上, 对碳管黏附石墨烯的系统进行三点弯曲试验, 研究碳管对石墨烯弯曲性能的影响。其中, 红色原子表示石墨烯, 蓝色原子表示黏附在石墨烯上面的碳管网络, 下方两条黄色原子表示固定原子, 上方黄色原子表示可以移动的加载端。石墨烯的势函数参考文献<sup>[2,3]</sup>, 碳纳米管之间的参数参考文献<sup>[4]</sup>。

### 3.2 微观增强机理

如图 1 所示, 随着加载端向下移动, 碳管黏附石墨烯系统的力明显高于纯石墨烯系统, 这主要得益于碳管较大的弯曲刚度。当加载端释放后, 碳管黏附石墨烯系统最终位移也明显小于纯石墨烯, 这是由于纯石墨烯弯曲刚度较小, 不能完全恢复; 但黏附碳管后, 其弯曲刚度明显增加, 最终位移也明显减少。图 2 揭示了相应机制及压入深度的影响。随着压入深度的增加, 其最终位移明显增加(见图 2a)。当压入深度较小时(图 2b-I), 碳管和石墨烯之间, 石墨烯和底部固定端之间不会发生明显滑动; 当压入深度增加时(图

\* 国家自然科学基金 (#12002034, #11972348, #11532013, #11872114, 和#12032004。)

2b-II), 碳管和石墨烯之间发生不可逆的滑动, 使系统不能完全恢复, 增加了最终的挠度; 当压入深度较大时 (图 2b-III), 碳管和石墨烯之间、以及石墨烯和底部固定端之间均发生不可逆的滑动, 进一步造成最终挠度的增加。

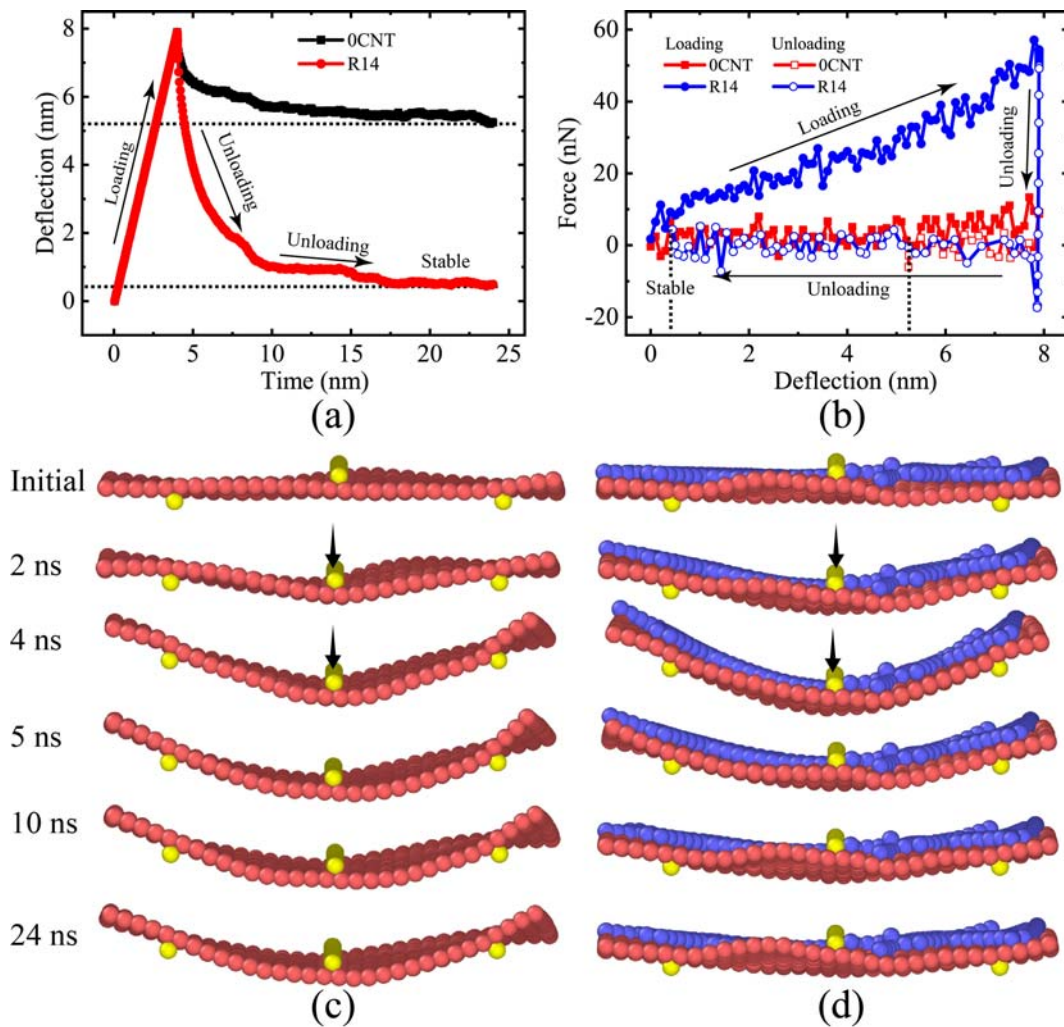


图1 碳管黏附石墨烯的三点弯曲及恢复试验。

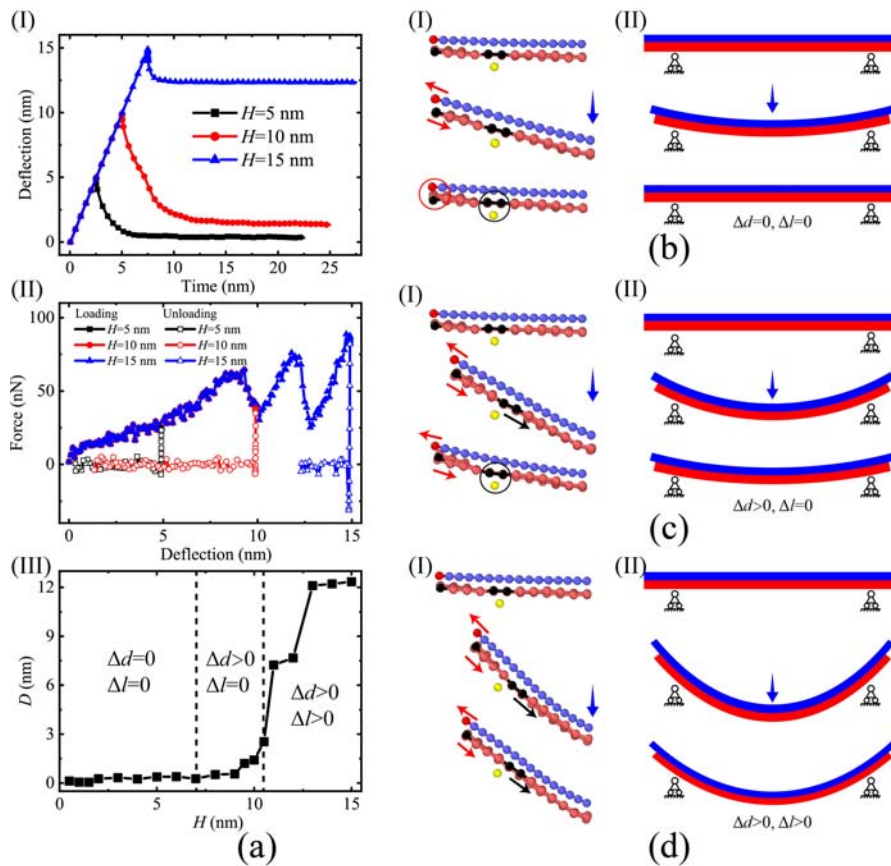


图2 碳管黏附石墨烯性能随压入深度的变化及相应机制。

### 三、结论

本文研究了碳管黏附的石墨烯的三点弯曲性能及其恢复性能。研究表明，表面黏附碳管的石墨烯相比于纯石墨烯，其弯曲刚度具有明显增强；对于碳管黏附石墨烯系统，随着压入深度的增加，其释放后的最终挠度明显增加，这主要是由碳管和石墨烯之间、石墨烯和固定端之间不可逆的滑动引起的。

### 参 考 文 献

- [1] KUANG J, DAI Z, LIU L, et al. Synergistic effects from graphene and carbon nanotubes endow ordered hierarchical structure foams with a combination of compressibility, super-elasticity and stability and potential application as pressure sensors [J]. *Nanoscale*, 2015, 7(20): 9252-60.
- [2] CRANFORD S, SEN D, BUEHLER M J. Meso-origami: Folding multilayer graphene sheets [J]. *Applied Physics Letters*, 2009, 95(12): 225502.
- [3] CRANFORD S, BUEHLER M J. Twisted and coiled ultralong multilayer graphene ribbons [J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2011, 19(054003-).
- [4] CRANFORD S, YAO H, ORTIZ C, et al. A single degree of freedom 'lollipop' model for carbon nanotube bundle formation [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2010, 58(3): 409-27.