

**MS5928**

## 基底表面粗糙度对石墨烯粘附与撕脱的影响

陈少华<sup>1</sup>, 陈浩<sup>1</sup>

1. 中国科学院力学研究所 LNM, 北京, 100190

*E-mail: zsma@xtu.edu.cn*

石墨烯是单层碳原子通过共价键形成的规则六方对称的理想二维晶体, 实验证明其具有超强的电学, 热学和力学性能, 是具有广阔应用前景的新材料。石墨烯作为涂层, 覆盖于基底表面, 一方面可以改善基底表面的抗腐蚀, 抗摩擦和抗氧化等性能, 亦可制备高新微纳器件。石墨烯和基底黏附的界面性能则直接影响着其功能的发挥。然而, 已有对石墨烯与粗糙基底最终界面黏附构型的认识仍存在分歧, 其原因如何? 本文采用分子动力学方法系统研究了石墨烯与粗糙表面基底的相互作用。研究发现, 石墨烯长度、基底表面粗糙度、石墨烯层数都是直接影响最终黏附界面构型的主要原因。随着表面粗糙度的减小, 石墨烯与粗糙基底间的界面形态发生从石墨烯水平搁置于粗糙基底表面, 到完全匹配粗糙表面的连续过渡, 存在的中间形态为石墨烯部分黏附于粗糙表面。理论分析发现该中间状态主要是石墨烯弯曲能、界面黏附能、及界面摩擦消耗能三者的竞争结果。尤其在石墨烯长度较大的情况, 石墨烯两端部先发生黏附, 界面的摩擦往往阻碍着界面完全黏附形成的可能。为了减少界面摩擦的影响, 我们提出了石墨烯倾斜法, 发现一定的倾斜角度可以大大促进石墨烯与粗糙基底间的完全粘附。但倾斜角度过大, 热震荡则会引起石墨烯发生自卷曲现象。进一步研究了石墨烯黏附于粗糙表面的撕脱过程。结果发现: (1) 石墨烯水平搁置在粗糙表基底面, 石墨烯可以直接从基体上撕开, 而不发生二次黏附; (2) 在部分粘附的情况, 发现一种类似于预应力薄膜撕脱过程中出现的突发脱黏现象; (3) 随基底表面粗糙度减小, 一般会发生连续撕脱过程, 最终趋于平表面撕脱的情况。由于界面粗糙度、界面黏附构型的影响, 不同角度撕脱时, 伴随发生二次黏附、界面滑移等有趣的现象。界面强度与撕脱角度、界面粗糙度、界面黏附构型直接相关。

**Keywords:** 石墨烯;粗糙基底;分子动力学;界面黏附构型;界面强度;

**Preferred Presentation Type:**