

# 低维纳米碳材料自组装及其增强复合材料的断裂行为

陈少华, 张存

中国科学院力学研究所, 北京 100190

E-mail: [shchen@LNM.imech.ac.cn](mailto:shchen@LNM.imech.ac.cn)

传统制备纳米碳管的技术难以控制碳管手性, 而碳管手性则强烈影响其应用功能。已有技术制备的纳米碳卷尺寸较小, 亦限制了其储氢等功能化应用。如何制备手性可控纳米碳管以及如何制备大尺度纳米碳卷结构, 成为本文研究的关键科学问题。另一方面, 纳米碳管增强新型复合材料具有非常重要的应用前景。然而纳米碳管与基体界面发生滑移破坏, 多壁纳米碳管则发生“剑脱鞘”的破坏, 两种破坏方式都近似脆性断裂, 如何提高低维碳材料增强复合材料的韧性?

本文应用分子动力学首先分析了石墨烯条带与单壁纳米碳管的相互作用。发现石墨烯条带在纳米碳管表面自发组装, 自组装结构和石墨烯条带与纳米碳管相对位置相关: 一种结构为纳米碳卷, 且多次组装可形成大尺度纳米碳卷; 另一种结构为疏松式及致密式石墨烯条带螺旋盘绕在碳管表面。进一步研究发现, 致密式石墨烯螺旋结构的相邻边界已经形成了稳定的 C-C 键, 即为纳米碳管; 而疏松结构则可以通过温度的调节或急速退火转变成纳米碳管, 且自组装形成的纳米碳管手性可控。

其次分析了单壁及多壁纳米碳管增强硅基复合材料的断裂破坏。发现长度较小碳管发生拔出破坏; 而长度足够的单壁纳米碳管发生断裂破坏, 多壁纳米碳管则发生“剑出鞘”破坏; 且两种破坏方式都类似于脆性断裂。进一步应用纳米碳卷代替纳米碳管, 来增强硅基复合材料。较短的纳米碳卷发生类似于纳米碳管拔出的破坏现象, 当长度足够的纳米碳卷由外至内连续发生断裂, 有效地提高了复合材料的断裂韧性, 且断裂韧性随碳卷层数增多而提高。该研究为提高纳米复合材料断裂韧性设计提供了新思想。

**关键词:** 纳米碳管; 纳米碳卷; 纳米复合材料; 自组装; 断裂韧性