

# 石墨烯泡沫材料的弹性机理研究

王超<sup>1</sup>, 陈少华<sup>2\*</sup>

(1. 中国科学院力学研究所, 北京, 邮编: 100190

2. 北京理工大学, 北京, 100081)

**摘要:** 石墨烯泡沫材料是一种新型纳米多孔材料, 具有大比表面积、耐腐蚀、超弹性、化学稳定性好等一系列出色的物理力学性能, 在锂离子电池、柔性电子器件、先进复合材料等领域有着广阔的应用前景。实验发现石墨烯泡沫材料具有极好的压缩弹性, 即压缩应变可高达 99%, 并且在载荷释放之后能够完全回弹。影响石墨烯泡沫材料性能的因素有很多, 包括石墨烯片的尺寸、厚度、石墨烯片之间的交联、交联的刚度、密度以及系统中夹杂的其他异质颗粒等, 由于实验手段的限制, 无法对这些因素进行精准的调控, 导致对石墨烯泡沫材料弹性的微观机制还没有完全搞清楚, 包括弹性的主要影响因素有哪些? 不同拉压载荷条件下弹性的表现有何不同? 相关机理有何区别? 等等。本文通过粗粒化分子动力学模拟方法对石墨烯泡沫材料的弹性机理进行了系统的研究, 发现:

(1) 石墨烯片厚度和片片间的交联密度是影响泡沫材料弹性的两个主要因素, 只有一定厚度的石墨烯片通过足够的化学交联连接在一起, 才能获得好的弹性性能, 二者缺一不可; (2) 泡沫材料的变形主要以系统的弯曲变形能为主, 材料所受的拉压载荷类型、片的尺寸、交联的参数等对此影响不大; (3) 压缩过程中几乎没有断键, 但是拉伸到一定应变 (0.2) 之后, 系统会不断发生断键, 正是断键导致了拉伸弹性受损。这些研究结果有助于理解石墨烯泡沫材料的弹性性能的微观机理, 对设计具有更好拉伸弹性的石墨烯泡沫材料也有一定的启发作用。

**关键词:** 石墨烯泡沫材料; 粗粒化分子动力学模拟; 力学性能; 微观机理。

\*基金项目: 国家自然科学基金项目 (#11532013, 11372317 和 11602270)

通讯作者: 陈少华, 1971, 教授, 表界面力学, E-mail: chenshaohua72@hotmail.com