

交联对碳纳米管网络材料大变形力学行为及断裂模式的调控机理研究¹

杨田, 王超

(中国科学院力学研究所 非线性国家重点实验室 北京 100190,
中国科学院大学 工程科学学院 北京 100049)

摘要 分子间强交联对碳纳米管网络材料的力学性能有至关重要的影响。当前对交联作用的基本模式及调控机理仍缺乏系统性的认识。本研究采用粗晶粒分子动力学模拟方法,研究了可断键的强交联碳纳米管网络材料的非线性大变形行为与断裂模式。研究表明,拉伸作用下,网络材料的主导变形模式随交联密度增加发生变化,当交联密度小于临界密度 ρ_c 时,材料由弯曲变形主导,交联密度大于临界密度后,主导变形模式为弯曲-拉伸-弯曲三阶段模式。变形模式的转变是由于发生拉伸大变形时,交联限制效应造成的应力集中高度积聚与化学键断裂。压缩作用下,材料主导变形模式始终为弯曲变形,不受交联密度与压缩应变的影响。此外,研究发现存在另一临界交联密度调控强交联碳纳米管网络材料韧脆转变,并从多层级微结构演化的角度对这一断裂模式转变进行解释。本研究对材料的优化设计与实际应用具有重要意义。

关键词: 强交联碳纳米管网络材料, 交联, 主导变形模式, 韧脆转变, 粗晶粒分子动力学模拟

¹ 基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (#11602270, #11972348); 中国科学院战略性先导科技专项子课题 (XDB22040503, XDB22040403)。