

超长一维材料的力学性能测量及分析

叶璇¹ 刘小明¹ 李喜德²

(1 中国科学院力学研究所, 邮编 100190; 2 清华大学航天航空学院, 邮编 100084)

摘要 近年来, 碳纳米管的优异力学性能引起了研究者的广泛关注。本文中, 通过对超长碳纳米管进行拔出实验, 测得了管壁间、管束中管间的相互作用力, 其中管束中碳管拔出载荷为 0.9 nN, 回缩载荷为 1.0 nN。进一步地, 对长度为 20–200 nm 的双壁碳纳米管的横向拔出过程进行了数值研究。分别建立了分子动力学模型和等效有限元模型, 用于预测不同长度双壁碳纳米管的横向拔出力, 并研究管间相互作用机理。

关键词: 碳纳米管, 管间相互作用力, 数值模拟。

一、引言

众所周知, 碳纳米管(CNTs)具有良好的力学性能, 如杨氏模量约 1 TPa, 与石墨片层相当(~1.06 TPa), 比碳纤维高一个量级(~230 GPa), 约为钢的 5 倍; 拉伸强度约 100 GPa, 而石墨片层强度约 36.5 GPa, 并且是钢的 200 倍; 断裂应变在 15.8%-18.7%之间。而目前报道的各种碳纳米管纤维、束、绳的平均模量仅为 256 GPa; 以不同方式制备的碳纳米管纤维的最高拉伸强度小于 10 GPa; 断裂应变大于 11%, 这些性能远不如单根碳纳米管的性能。碳纳米管纤维/束力学性能差的主要原因是各种因素和缺陷影响宏观碳纳米管材料承载能力, 如碳纳米管纺丝强度取决于纺丝中管细束的强度、长度、界面强度、单根碳纳米管在纱线中的排列、孔隙特性等。模拟表明在单根碳纳米管理想排列和没有其它缺陷的情况下, 制约碳纳米管纱线力学性能的主要因素是碳管间弱的界面强度, 失效主导模式是界面滑移; 提高界面强度的两种主要方法是: 缩小管束的直径、增加管束中管与管之间的交联, 使失效模式变为碳纳米管断裂。

因此, 直接测量和分析超长碳纳米管的力学性能与影响因素成为重要的研究课题。如何准确测量和预测这种跨尺度的一维材料的力学性能是当前的一大挑战。原因是由于非常巨大的细长比 (10^7 - 10^8), 即长度方向为宏观尺寸, 直径方向为纳米量级。这使得在实验过程中, 操纵、夹持与加载均非常困难。因此, 直接测量超长碳纳米管管壁间、管束中管间相互作用力, 以此研究管壁间和碳管间载荷的传递与相互作用机理, 对于理解超长碳纳米管的力学性能具有重要的意义。

二、管间相互作用力测量及模拟

3.1 实验测量方法

为了研究一维超长材料的力学性能, 我们建立了一套多尺度测量系统, 包含两个模块, 适合 mm- μ m 尺度试样力学性能测量的 MTM μ 模块, 以及适合 μ m-nm 尺度试样测量的 MTM μ 模块。为了实现不同范围的载荷测量, 研制了三类力传感器, 后屈曲式、静电梳齿式和应变式力传感器, 并对三类传感器的重复性、稳定性进行了验证。基于这套系统, 分别在光学显微镜和扫描电子显微镜下, 通过弦张拉的方式对超长碳纳米管进行连续加载, 实现原位拉伸及拔出测量。在此之前, 通过负载无机颗粒的方式解决其光学

可视化的问题。

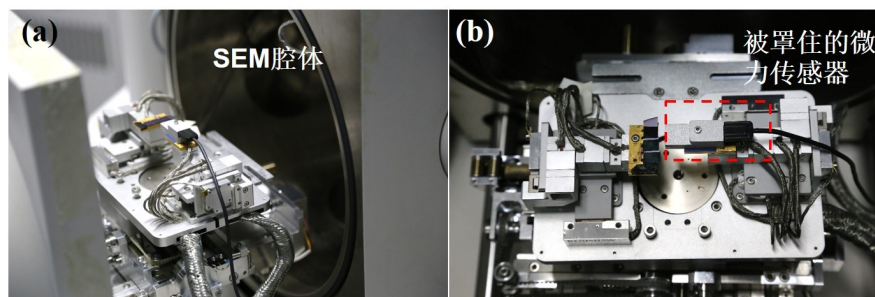


图1 多尺度测量系统

3.2 测量结果

基于上一节测量系统和测量方法，开展了单根碳纳米管及碳纳米管束的拔出实验，得到了外壁断裂后内管拔出的载荷位移曲线，测得了管束中纳米管拔出的平均载荷为 0.9 nN，回缩载荷为 1.0 nN，小于 Filleter 等人对微米长度碳管绳拔出实验测得的拔出载荷 (1.7 ± 1.0 nN)，而高于分子动力学模拟结果约 0.3 nN。在实验过程中还发现了内管拔出回缩过程载荷出现明显的震荡，类似于 slip-stick 耗散的突变载荷。

3.3 数值模拟方法

为了更精细地研究这一过程，开展了相应数值模拟研究。包括利用分子动力学模拟长度为 20-60 nm 的碳纳米管的横向拔出，以及基于有限元，通过对较强的范德华法向相互作用和较弱的管间剪切相互作用进行等效，来模拟长度范围在 30-200 nm 的碳纳米管的横向拔出过程，其有限元模型示意图见图 2。

对于法向相互作用等效，通过分子动力学模拟两片石墨烯分离，得到压力-距离变化曲线，作为在 ABAQUS/Explicit 中定义内外管的相互作用关系的依据。对于管间剪切相互作用等效，通过分子动力学模拟内管沿轴向的拔出，发现稳定拔出段拔出力不随拔出位移变化而变化，因此，在有限元模型中外管的端部圆周上分别施加 1.18 nN 的切向力。基于这一等效，以长度为 30 nm 的管为例进行有限元计算，分子动力学模拟与有限元计算结果吻合，证明有限元计算可靠。

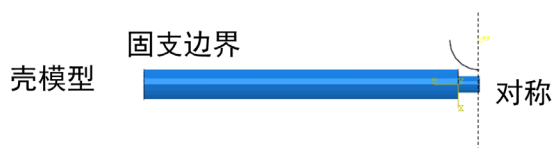


图2 碳管横向拔出的有限元模型示意图

3.4 数值模拟结果

通过数值模拟研究发现，对于长度小于 60 nm 的双壁碳纳米管，外管屈曲与内管滑动同步，外管屈曲位置与内管根部重合；而对于长度大于 60 nm 的双壁碳纳米管，内管先滑动，然后外管屈曲，外管屈曲位置与内管根部不重合。对不同长度的碳纳米管，横向拔出力最终都趋向于同一个稳定值，与实验结果相吻合。

三、结论

本文通过实验和数值模拟研究了超长碳纳米管管间相互作用,测量并分析了其相互作用力。首次在 OM 下直接测量了厘米长度的 ULCNTs 管壁间、管间相互作用力,发现了拔出回缩过程中载荷有明显的震荡。进一步地,建立了双壁碳管横向拔出的等效有限元模型,能够准确地预测碳管拔出过程中载荷的变化。

参 考 文 献

- 1 Yakobson B, Samsonidze G, Samsonidze G. Atomistic theory of mechanical relaxation in fullerene nanotubes. *Carbon*, 2000, 38:1675-1680
- 2 Zhu L, Wang J, Ding F. The Great Reduction of Carbon Nanotube's Mechanical Performance by a Few Topological Defects. *ACS nano*, 2016
- 3 Zhang R, Zhang Y, Zhang Q, et al. Optical visualization of individual ultralong carbon nanotubes by chemical vapour deposition of titanium dioxide nanoparticles. *Nature communications*, 2013, 4:1727
- 4 Ye X, Cui Z, Fang H, Li X. A Multiscale Material Testing System for In Situ Optical and Electron Microscopes and Its Application. *Sensors* 2017, 17 (8), 1800
- 5 Cumings J, Zettl A. Low-friction nanoscale linear bearing realized from multiwall carbon nanotubes. *Science*, 2000, 289:602-604
- 6 Kis A, Jensen K, Aloni S, et al. Interlayer forces and ultralow sliding friction in multi-walled carbon nanotubes. *Physical Review Letters*, 2006, 97:025501
- 7 Filletter T, Yockel S, Naraghi M, et al. Experimental-computational study of shear interactions within double-walled carbon nanotube bundles. *Nano letters*, 2012, 12:732-742
- 8 Ye X, Wang T, Zhuang Z, Li X. Tensile properties of individual multicellular *Bacillus subtilis* fibers. *Science China, Physics Mechanics & Astronomy*, 2019, 62 (9), 994611