

碳管/石墨烯复合泡沫材料压缩行为的微观变形机理*

王帅¹ 王超² 陈少华¹

¹ (北京理工大学先进结构技术研究院, 100081)

² (中国科学院力学研究所非线性力学国家重点实验室, 100190)

摘要 石墨烯泡沫材料由于其轻质、高比表面积、超弹性、强耗散能力和高导电性等优异性能而受到人们的广泛关注, 近年来的研究发现通过在石墨烯泡沫材料中引入碳管, 形成碳管/石墨烯复合泡沫材料可以进一步提升材料的力学性能, 然而, 当前研究对于该复合泡沫材料的微观变形机理还不清楚。本文采用粗粒化分子动力学方法, 研究了碳管/石墨烯复合泡沫材料在压缩变形过程中的微观变形机理, 揭示了两种碳管增强石墨烯泡沫材料压缩性能的微观机制。研究表明, 对于由单层石墨烯组成的泡沫材料, 碳管主要通过增强单片石墨烯的弯曲刚度, 进而增强复合泡沫材料的整体压缩性能; 而对于由多层石墨烯组成的泡沫材料, 碳管主要通过增加单片石墨烯表面粗糙度, 进而影响石墨烯片之间的相互滑动, 并最终增强整体泡沫材料的宏观性能。本文研究结果为实验上制备高强石墨烯泡沫材料提供了设计依据。

关键词: 碳管, 石墨烯, 泡沫材料, 微观变形机理, 压缩

一、引言

近年来的研究认为, 碳管/石墨烯复合泡沫材料由于碳管和石墨烯之间的协同效应而展现出优于单一材料组成的泡沫材料的力学性能[1], 但目前对于复合泡沫材料通过碳管和石墨烯之间协同效应进而增强复合泡沫材料整体力学性能的微观机理尚不清晰。

近年来, 粗粒化分子动力学方法在揭示碳管网络材料和石墨烯泡沫材料的微观机理中展现出巨大的优势, 本文采用粗粒化分子动力学方法揭示了碳管/石墨烯复合泡沫材料的微观增强机理。

二、正文

2.1 模型及势函数

碳纳米管随机粘附在单片石墨烯上, 碳管粘附的石墨烯随机分布形成碳管/石墨烯复合泡沫材料。石墨烯的势函数参考文献[2, 3], 碳纳米管之间的参数参考文献[4]。

2.2 微观变形机理

碳管增强单层石墨烯复合泡沫材料宏观力学行为的微观变形机理如图 1 所示。

* 国家自然科学基金 (#11872114, #11532013, #11602270, #11972348)

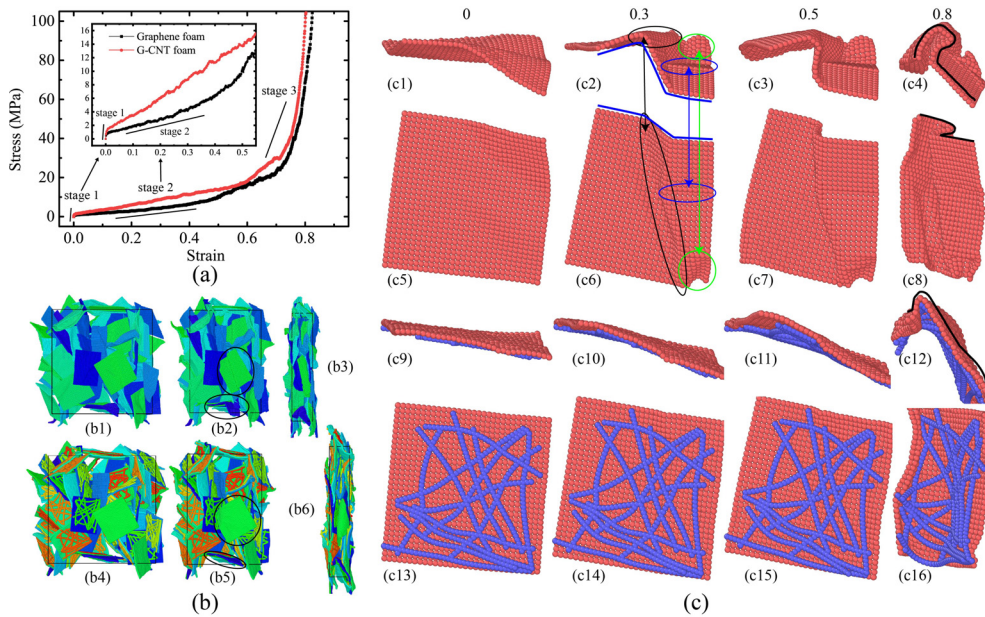


图1 碳管/单层石墨烯复合泡沫材料微观增强机理

碳管增强八层石墨烯复合泡沫材料宏观力学行为的微观变形机理如图2所示。

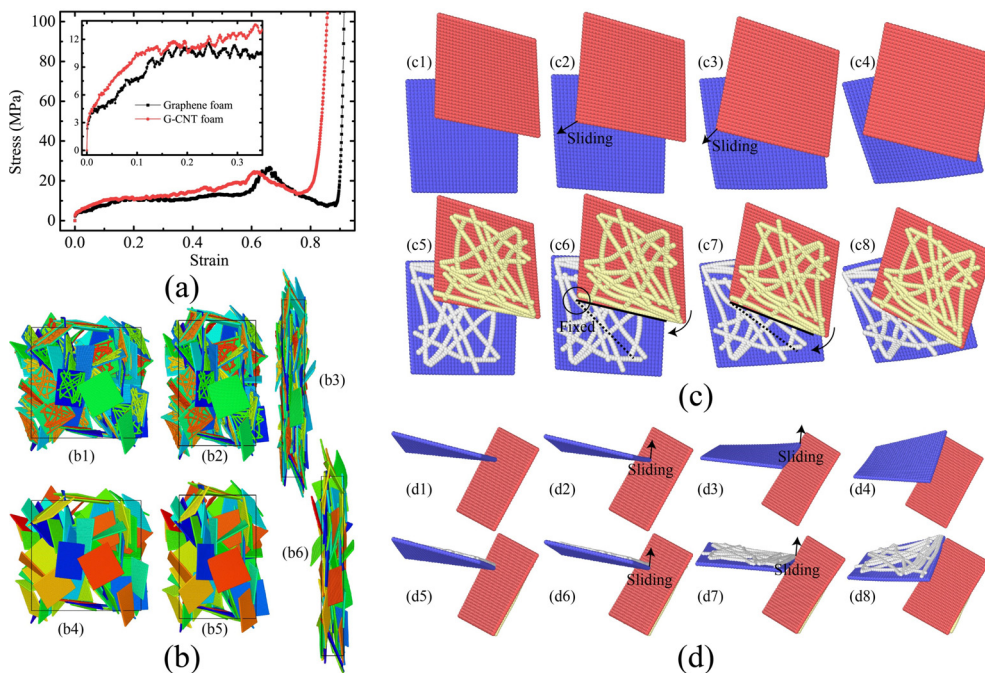


图2 碳管/八层石墨烯复合泡沫材料微观增强机理

三、结论

本文研究了碳管增强石墨烯泡沫材料压缩性能的微观变形机理。研究表明，对于由

单层石墨烯组成的泡沫材料，由于碳管的弯曲刚度明显高于石墨烯，粘附在单层石墨烯上的碳管可以明显提升单片石墨烯的弯曲刚度，进而增强泡沫材料的整体压缩性能。碳管的弯曲刚度远远小于八层石墨烯，因此粘附在八层石墨烯上的碳管几乎不影响石墨烯的弯曲性能，但是由于碳管增加了石墨烯的表面粗糙度，阻碍了石墨烯片之间的相对滑动，最终提升了石墨烯泡沫材料的力学性能。

参 考 文 献

1. Kuang, J., et al., *Synergistic effects from graphene and carbon nanotubes endow ordered hierarchical structure foams with a combination of compressibility, super-elasticity and stability and potential application as pressure sensors*. *Nanoscale*, 2015. **7**(20): p. 9252-9260.
2. Cranford, S., D. Sen, and M.J. Buehler, *Meso-origami: Folding multilayer graphene sheets*. *Applied Physics Letters*, 2009. **95**(12): p. 225502.
3. Cranford, S. and M.J. Buehler, *Twisted and coiled ultralong multilayer graphene ribbons*. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2011. **19**: p. 054003-054003.
4. Cranford, S., et al., *A single degree of freedom 'lollipop' model for carbon nanotube bundle formation*. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2010. **58**(3): p. 409-427.