

石墨烯力学性能研究进展

焦涵

(山东科技大学能源与矿业工程学院 山东青岛 266590)

摘要：石墨烯又被称作是二维石墨片，由单层碳原子的共价键结合而成的二维晶体，具有规则六方对称特点。石墨烯的力学性能，主要表现为二维石墨烯的稳定性、强度力学性能参数特殊，力学性能与温度存在相关性。为研究石墨烯的力学性能，下文分析最新的研究进展，提出具体力学性能的研究依据。

关键词：石墨烯；力学性能；研究进展

当前石墨烯力学性能研究中，原子厚度纳米薄膜方面的研究存在困难，主要通过实验测试方式、数值模拟方式与理论分析方式，研究石墨烯的力学性能，明确具体的力学性能特点，了解实际情况，便于开展研究工作与分析工作。

1 石墨烯力学性能的研究方法

石墨烯的力学性能研究，主要就是纳米材料的力学性能分析，属于固体力学领域之内首要关注的科学问题，具有重要的石墨烯力学性能研究意义。目前在实际研究工作中，主要采用实验测试方式、数值模拟方式研究，具体为：

1.1 实验测试的方式

李东波，刘秦龙，张鸿驰等专家^[1]在研究中分析石墨烯的力学性能，采用纳米材料的力学性能实验分析方法，但是在研究中发现测试的难度较高，主要原因就是质量较高的石墨烯原材料，制备起来十分困难，可供使用的实验测试机械设备很少，测量的精确度较低，不能确保实验测试的工作效果。所以，建议采用原子力显微镜纳米压痕的实验测试技术方式、弹性模量的测试方式等，分析石墨烯的力学性能，使用多点测试的方式，明确具体的石墨烯力学性能特点。

1.2 数据模拟的方式

张聂，卢小菊，孟鸳鸯等专家^[2]在研究中采用数据模拟方式，研究石墨烯的力学性能，搜集数据信息内容，按照分子力学的研究理论，分析分子力场特点，创建出原子间的微观变形运动和势能变化关系的数据模型，模拟其中的力学性能数据内容。在力学性能数据方面，主要涉及到温度变化数据、原子体系动态变化数据等，可将分子动力学的特点彰显出来，搜集分子结构变化时间函数信息，深入研究石墨烯的原子运动机制，将石墨烯的运动规律揭示出来，搜集结晶数据、膨胀数据等等，通过分子动力学模拟的方式，设置计算模型，准确研究石墨烯的力学性能数据信息。

2 石墨烯力学性能的研究

2.1 石墨烯不平整与稳定性的力学性能

上个世纪中期，石墨烯主要以二维晶体的形式存在异议，根据弹性理论二维薄膜有限温度的情况，会有不稳定性，还会有弯曲的状况。所以，认为石墨烯的二维晶体结构，会受到热力学不稳定性因素的影响，无法独立存在。但是，刘宾，周明扬，任凌宝等专家^[3]在研究中，将石墨烯设置在三维空间，利用透射电子显微镜设备，全面观察了实际情况，采用数值模拟的方式处理，发现石墨烯并非完全平整，在表面形成褶皱，出现褶皱的原因，可能和二维石墨烯的环境存在直接联系。对比研究之下，石墨烯之内的碳原子，在薄膜周围没有形成紧邻的原子，很容易出现失稳的现象，稳定性也无法恢复。且褶皱现象的产生，也和碳碳键柔性存在直接联系，从理论方面来讲，碳碳键长度是 0.14 纳米，自由状态中石墨烯的薄膜碳碳键长度在 0.13 到 0.15 纳米之间。除此之外，石墨烯在边界方面，

还有稳定性的问题，主要因为边界具体结构与外形，会对石墨烯的性质造成直接影响，郭思瑶，王腾腾，聂蕊等专家^[4]在研究中，利用有限元分析模型、原子模型，发现石墨烯边界会形成压力，在压力的影响之下石墨烯的薄膜边界会出现翘曲的现象。使用扫描透射电镜，对没有支撑的石墨烯原子晶格试验观测，配合数值的分析，在研究后发现没有支撑的石墨烯，边界有重组卷曲的现象，形成了直径很小的纳米管，卷曲的原因和石墨烯的边缘悬键存在直接联系，悬键的存在会导致石墨烯边缘能量增加，出现变形现象，其中的边界处的应力会有所减少。

2.2 弹性模量、强度的力学性能分析

近年来在石墨烯的力学性能研究工作中，弹性模量与强度的力学性能参数，属于重要的部分，其中弹性模量力学性能参数的研究，是在连续介质框架之下，实现力学概念的研究。从本质上来讲，石墨烯主要是由单层碳原子所组成，厚度研究中需要利用连续介质假设的方式，全面计算力学性能参数。然而，当前在研究的工作中，人们尚未形成统一认知，部分研究者认为，石墨烯的单个碳原子半径在 0.06 纳米，一些研究者认为石墨烯的晶体厚度为 0.33 纳米，这就导致在使用不同厚度指标的情况下，得到的弹性模量结果也存在差异。王月欣，王凡，邢文晓等专家^[5]在实验测试的工作中，认为石墨烯属于二维结构，宏观材料的测试技术不能获取到准确的石墨烯力学性能信息，采用弹性模量的方法，可通过原子力显微镜测试方式，明确石墨烯的弹性性能，了解到石墨烯具备较高的柔韧性，假设石墨烯的厚度是 1 纳米，采用弹性模量的计算结果为 $(0.25 \pm 0.15) \text{ TPa}$ 。同时使用原子力纳米压痕实验方式，可针对石墨烯的多层次弯曲刚度与应力特点全面研究，了解其和薄膜厚度之间的关系，明确提出了具有依赖关系，在研究中还发现弯曲刚度与应力会在薄膜厚度提升的情况下增加。从数值模拟的角度来讲，国内与国外的学者通过第一性原理从头计算、分子结构力学计算等方式，研究石墨烯的具体力学性能，通过弹性模量与强度预测的方式，研究石墨烯的变形破坏机制，分析石墨烯的具体力学性能指标。

2.3 温度相关性与应变率相关性的研究

石墨烯具有较高的力学性能，和碳原子相互的化学键、电子结构之间存在直接联系，内部主要就是 α 键，所有的碳原子，均被局限在一个平面以内，这也是石墨烯强度较高、刚度较强的主要原因。按照具体的统计力学原理分析，石墨烯的温度数值，对碳原子的热振动剧烈程度会产生直接影响，所以在温度改变的情况下，石墨烯的力学性能也会出现变化。康永，艾江等^[6]在研究中分析碳纳米管轴向压缩与拉伸的具体数据值，发现碳纳米管的力学性能，和外部的温度存在直接联系，在温度提高的情况下，力学性能的数值就会发生改变。从拉伸极限与强度方面来讲，系统温度提升之后，总动能就会有所增加，碳原子的热运动越来越激烈，活跃度有所提升，在平衡的位置出现振动，温度增加之后振动的幅度提高。温度升高

的情况下,碳原子相互的吸引力逐渐降低,很容易与平衡位置相互脱离,出现失稳的现象,诱发变形的后果。

石墨烯中含有膨化石墨与纳米黏土,利用表面官能化的形式,会形成可以控制的化学缺陷状态,例如:表面羟基加入聚合物基本材料,会起到改善材料力学性能的作用,因为羟基官能团与制备氧化石墨的工作中,所形成的缺陷,会导致石墨烯表面有褶皱,纳米级别表面不平整,会使得石墨烯和聚合物链相互的作用增强。且官能化石墨烯的表面中含有羟基化学基团,容易发生不可逆团聚,能够和极性高分子相互整合,形成相应的氢键。除此之外,石墨烯比表面积较大,会和聚合物相互形成界面作用,可使得界面荷载传递发生改变,具有增效的作用。唐秋明,甄天熠,李丹云等专家^[7]在研究中,采用弹性模量与强度分析法,全面分析了石墨烯的力学性能特点,明确石墨烯具有一定的抗弯刚度,再加上其有导电性与透明性,柔性微纳米电子器件中具有一定应用潜力,可应用在微纳米的电子器件制造领域中。使用各种形状的石墨烯自动包裹液滴,可通过“折纸”类型的制造方式,制作功能化类型的纳米器件,但是,这个过程属于一次性的,难以进行控制。实际研究中还可以发现,石墨烯的应用领域较为广泛,具有应用价值,如果可以充分借助石墨烯材料,研究弹性模量数值、抗弯刚度数值等力学性能,可拓宽其应用的领域。

3 结束语

近年来我国在石墨烯的力学性能研究方面已经取得了良好成绩,可将石墨烯在各个领域中的应用潜力、前景等表现出来。上文主要分析石墨烯的力学性能,发现石墨烯二维纳米结构具有较高的刚度与强度,但是和物理化学性质的研究相互对比,石墨烯的力学

性能研究,还处于初步发展的阶段,应该重点研究化学领域的力学性能特点,明确石墨烯的拉伸力学性能、复杂力学性能与多层石墨烯力学性能,在研究中明确石墨烯在电子器件生产领域中的应用优势与特点,通过综合性的研究分析,明确石墨烯的力学性能标准,有效开展石墨烯的力学性能研究活动,为石墨烯在各个领域中的高质量应用提供依据。

参考文献:

- [1]李东波,刘秦龙,张鸿驰, et al. 基于分子动力学的氧化石墨烯拉伸断裂行为与力学性能研究[J]. 力学学报, 2019,44(5): 1393-1402.
- [2]张聂,卢小菊,孟鸳. 氧化石墨烯增强聚丙烯酰胺水凝胶的力学性能[J]. 高分子材料科学与工程, 2019,35(9)133-239.
- [3]刘宾,周明扬,任凌宝, et al. 石墨烯增强镁合金塑性加工的组织与力学性能[J]. 材料科学与工艺, 2019, 27(01):15-21.
- [4]郭思瑶,王腾腾,聂蕊, et al. 高分散石墨烯改性水泥基材料力学性能的研究[J]. 化学与粘合, 2019,67(6):438-442.
- [5]王月欣,王凡,邢文晓, et al. 改性剂对氧化石墨烯/铸型尼龙复合材料力学性能的影响[J]. 塑料科技, 2018,45(12)99-128.
- [6]康永,艾江. 石墨烯/聚氯乙烯复合材料的研究进展[J]. 聚氯乙烯, 2018, 43(3):12-23.
- [7]唐秋明,甄天熠,李丹云, et al. 石墨烯/羟基磷灰石复合材料力学性能的数值研究[J]. 计算物理, 2018, 35(1):71-76.

作者简介:

焦涵,男(1999.11-),山东德州人,现于山东科技大学攻读学士学位,目前主要从事于理论与应用力学相关的专业。