

碳纳米管 - 聚乙烯复合材料界面力学特性分析*

张忠强^{1)†} 程广贵¹⁾ 刘珍²⁾ Y. Xue³⁾ 丁建宁¹⁾ 凌智勇¹⁾

1) (江苏大学机械工程学院, 微纳米科学技术研究中心, 镇江 212013)

2) (江苏科技大学船舶与海洋工程学院, 镇江 212003)

3) (Department of Mechanical and Aerospace Engineering, Utah State University, Logan, UT 84322)

(2011年9月7日收到; 2011年10月30日收到修改稿)

本文采用分子动力学模拟办法对碳纳米管 - 聚乙烯复合材料的界面力学特性进行了模拟和分析. 通过对单壁碳纳米管从无定形聚乙烯中抽出过程进行模拟, 研究了界面剪切应力随碳管滑移速度、聚乙烯分子链长和碳纳米管管径之间的变化关系, 并对界面的滑移机理进行了讨论. 模拟结果发现, 随着聚合物分子链长的增加, 界面临界剪切应力有显著增大, 而滑移剪切应力略显增加; 界面临界剪切应力和滑移剪切应力随着碳纳米管管径的增大而明显增加. 本文同时对界面应力的变化机理进行了模拟和讨论.

关键词: 碳纳米管, 聚乙烯, 分子动力学, 界面力学特性

PACS: 62.25.+g, 68.35.-p, 02.70.-c, 61.46.-w

1 引言

碳纳米管具有很高的弹性模量和拉伸强度, 所以是制造高等聚合物复合材料的理想选择^[1]. 近来, 碳纳米管 - 聚合物复合材料已经在实验室中制造出来^[2], 并对其力学和热学性能^[3]进行了测试以探索其作为轻质纳米材料的潜质^[4,5]. 这些复合材料拥有很高的弹性模量, 这也预示着它们必然担当一些承受载荷的应用^[4-8]. 对于复合材料而言, 界面载荷传递非常重要, 研究碳纳米管 - 聚合物复合材料中的界面载荷大小对于提高碳管 - 聚合物复合材料的强度和硬度具有重要的意义. 目前对于聚合物和碳纳米管的界面特性还没有明确的定义, 所以本文采用分子动力学方法, 通过计算碳纳米管 - 聚合物的界面相互作用来研究界面载荷传递的机理, 并探讨几种参数对界面载荷的影响.

在短纤维复合材料中, 体现最大承载能力的界面剪切强度已经在实验中通过纤维抽出或者推出办法测试出来^[9,10], 且实验已经证实碳管 - 聚合物

复合材料中的界面载荷很弱, 原因在于界面处碳管和聚合物之间很难生成化学键^[4,8,11,12]. 因此, 复合材料界面处在没有分子链连接的情况下, 碳管和聚合物之间的相互作用还是以范德华力为主. 然而, 在实验中很难测出界面的作用机理, 所以分子动力学办法在研究碳纳米管 - 聚合物复合材料的界面载荷传递机理发挥了重要的作用^[13,14].

与纤维抽出实验类似, 分子动力学办法也可以模拟碳纳米管从聚合物阵列中抽出的过程, 以此来探查聚合物界面的加强和失效机理. 之前的研究中, 针对(10, 10)碳纳米管在无定形聚合物中的情况, 采用分子动力学办法已经预测出其临界剪切应力的大小范围在18—135 MPa^[15]. 结果显示界面结合能和摩擦力在界面在界面强度中只发挥了很小的作用, 而聚合物中的螺旋状分子链对碳纳米管的包裹和缠绕可以很大程度提高碳管 - 聚合物复合材料的力学性能. 碳纳米管 - 聚苯乙烯复合材料的力学性能的分子动力学研究已经证实, 在界面处没有化学键存在的情况下, 界面载黏附力主要来源于范德华力的作用^[16]. 然而, 化学键在界面处承担

* 国家自然科学基金 (批准号: 11102074, 51005103), 江苏省自然科学基金面上项目 (批准号: BK2011463) 和江苏大学高级专业人才科研启动基金 (批准号: 11JDG024) 资助的课题.

† E-mail: zhangzq@ujs.edu.cn

载荷的作用也不容忽视,已有研究表明碳纳米管-聚合物复合材料的界面载荷承受能力和复合材料的弹性模量都随着成键分子链的增加而明显增强^[17],所以碳纳米管和聚合物界面处的化学键部分承担载荷传递的作用.如果采用牛顿内摩擦定律来描述碳纳米管在外力作用下的整个抽出过程中的界面滑动^[18],界面剪切作用力与滑动速度将近似成线性关系,且线性关系的斜率即为有效黏性系数.聚合物阵列密度、成键分子链以及碳纳米管几何属性等参量对界面载荷大小有着明显的影响,且界面处存在成键分子链情况下的界面剪切应力远高于不存在界面成键分子链的情况,而碳纳米管本身的五环-七环缺陷对界面剪切应力的影响不大^[19].在数值模拟办法的拓展方面,Liu等^[20]基于分子动力学模拟办法,针对碳纳米管-聚合物黏附无键界面模型提出了一种新的边界元办法,并验证了该边界元办法的有用性和有效性,预言了该办法可以作为一种在大尺度上研究碳纳米管-聚合物复合材料的快速数值工具.模拟结果与实验结果的对比方面,Gou等^[21]采用分子动力学办法预测了基于凝固环氧树脂模型下碳纳米管环氧复合材料的界面键合作用,发现碳管抽出过程模拟所得出的从环氧树脂到碳纳米管的有效载荷传递结果与他们的实验结果符合.此外,Wei^[22]采用分子动力学办法研究了碳纳米管聚合物复合材料的温度依赖黏附行为,发现范德华作用支配下的界面剪切应力随着碳管轴向施加的拉伸应变线性增加,而随着温度的升高而降低.

综上所述,很多研究者针对碳纳米管-聚合物复合材料的界面力学特性进行了研究,考虑了聚合物形态、系统温度、碳纳米管-聚合物之间的成键分子链和碳纳米管的缺陷等因素对界面力学特性的影响.但是由于实验方面的限制,目前对于碳管和聚合物界面处作用方式及机理还没有明确的界定.因此,本文继续开展碳纳米管-聚合物复合材料的界面力学特性及作用机理方面的分子动力学研究,主要通过碳管在无定形聚乙烯中的运动模拟,探讨碳纳米管-聚合物复合材料中聚乙烯分子链长、碳纳米管管径及模拟尺寸的影响.

2 方法和模型

2.1 势函数的选择

本文采用经典分子动力学软件 LAMMPS^[23]

对碳纳米管-聚合物复合材料进行模拟,使用 Velocity-Verlet 准则解牛顿运动方程,时间步长为 10^{-16} s. 采用 Brenner 势^[24]来描述碳纳米管中碳-碳原子之间的相互作用,修正 AMBER 势^[25]来描述聚乙烯分子之间及分子内部的相互作用.设定聚乙烯分子系统总势能为 E_{tot} ,它包括键的拉伸能 E_{bs} 、弯曲能 E_{be} 、扭转能 E_{to} 和无化学键作用的范德华势能 E_{vdW} ,具体表达形式如下:

$$E_{\text{tot}} = E_{\text{bs}}(r) + E_{\text{be}}(\theta) + E_{\text{to}}(\phi) + E_{\text{vdW}}(\bar{r}), \quad (1)$$

$$E_{\text{bs}}(r) = \sum_{\text{atom}} [k_r(r - r_0)], \quad (2)$$

$$E_{\text{be}}(\theta) = \sum_{\text{atom}} [k_\theta(\theta - \theta_0)], \quad (3)$$

$$E_{\text{to}}(\phi) = \sum_{\text{atom}} [V_1 \cos \phi + V_2 \cos 2\phi + V_3 \cos 3\phi + V_6 \cos 6\phi], \quad (4)$$

$$E_{\text{vdW}}(\bar{r}) = 4\varepsilon[(\sigma/\bar{r})^{12} - (\sigma/\bar{r})^6], \quad (5)$$

其中, E_{bs} 是以键长 r 为函数的二体势,平衡键长 $r_0 = 0.1533$ nm, k_r 为键的拉伸刚度; E_{be} 是随键角 θ 变化的三体势, $\theta_0 = 109.5^\circ$ 是平衡键角, $k_\theta = 56.25$ kcal/mol 是键弯曲刚度 (1 cal = 4.18 J). E_{to} 是随二面角 ϕ 变化的四体势, E_{vdW} 是随着无键粒子间距 \bar{r} 变化的另一个二体势, ε 为势阱深度, σ 为范德华零势能距离. 其中,范德华势能还包括 $E_{\text{vdW}} = E_{\text{vdW,PE}} + E_{\text{int}}$, $E_{\text{vdW,PE}}$ 表示聚乙烯分子链之间的相互作用, E_{int} 表示聚乙烯分子与碳纳米管上碳原子之间的相互作用. 聚乙烯势函数形式及参数设置参照文献 [19], 碳纳米管-聚合物界面相互作用参数分别为 $\varepsilon = 0.4492$ kJ/mol 和 $\sigma = 0.401$ nm^[26].

2.2 碳纳米管-聚乙烯复合材料模型的建立

本文采用的模型是一根单壁碳纳米管嵌入到无定形聚乙烯中,碳纳米管与聚乙烯分子之间无化学键作用,如图 1 所示.在 x (碳管轴向方向)和 y 两个方向上实施周期性边界条件, z 向的聚乙烯边界被固定(图 1 中上下条形框中部分),系统温度保持在 300 K,使碳纳米管沿 x 方向匀速运动,从而研究界面力学特性及边界处聚乙烯分子的微观构型.碳纳米管-聚乙烯复合材料模型的建立过程如下:

1) 建立无定形聚乙烯模型: 采用随机步行法在 fcc 晶格中随机产生聚乙烯分子碳链中各个碳原子的坐标作为无定形聚乙烯初始构型 [27].

2) 获取无定形聚乙烯的平衡构型: 把初始构型在温度 300 K 下采用 NPT 系综松弛 1000000 个分子动力学时间步, 得到内部压力近似为零的平衡构型.

3) 生成圆柱形孔洞: 采用一个圆柱形数值压头放置在模拟盒子的中心位置, 圆柱中轴线与 x 方向一致. 该数值压头的数值模型为, 处在圆柱孔洞部位的聚乙烯分子都将受到大小为 $F(r) = -k(r - R)^2$ 的作用力, 其中 k 为受力强度系数, r 是受力区域的作用半径, $R = R_{CNT} + R_{cutoff}$, R_{CNT} 为碳管半径, $R_{cutoff} = 2.5 \sigma$ 是截断半径.

4) 建立碳纳米管 - 聚乙烯复合材料模型平衡构型: 把扶手椅型单壁碳管放置到圆柱孔洞中, 采用 NPT 系综平衡 500000 分子动力学时间步, 温度始终保持在 300 K, 这样就得到了碳纳米管 - 聚乙烯复合材料平衡构型.

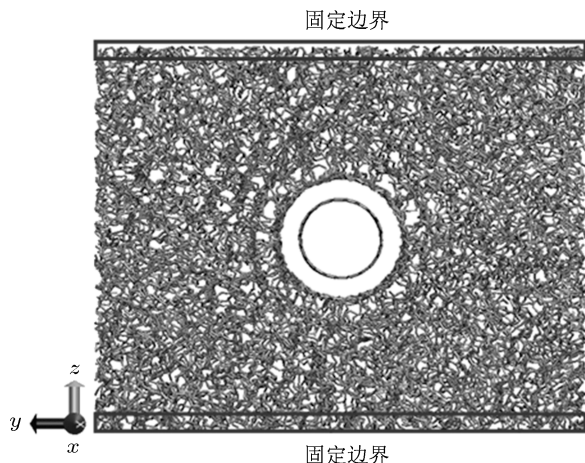


图 1 碳纳米管 - 无定形聚乙烯复合材料模型. 其中, z 方向上的两个边界 (即条形框内的原子) 为固定边界, x 和 y 两个方向上实行周期性边界条件

得到平衡构型之后, 把系统温度从 300 K 降至 0 K, 用此办法来消除碳管在聚乙烯中滑动过程中热震荡对界面力学特性的影响 [19]. 本文模拟中, 碳纳米管在聚乙烯中滑动速度的范围是 10—100 m/s, 且滑动过程中碳纳米管都看作是刚性的, 因为碳纳米管的刚度远大于聚乙烯分子团簇的刚度, 所以对界面力学特性的研究结果不会造成很大影响 [20].

3 结果与讨论

3.1 碳纳米管滑动过程中的能量变化

首先我们针对一个扶手椅型 (10, 10) 单壁碳纳米管在聚乙烯中的滑动过程进行模拟, 其中聚乙烯模型为 100 个分子链, 链长为 200 个单体 ($-\text{CH}_2-$ 或 $-\text{CH}_3$)/链 (本文中, 单体/链简称为 mpc). 界面剪切应力 (ISS) 可以通过公式 $\tau_I = F_{CNT}/2\pi rL$ 计算, 其中 F_{CNT} 是碳管管壁外表面所受到的剪切力, 方向沿着碳管轴向方向, r 是碳纳米管的半径, L 是嵌入在聚乙烯内部的碳管的长度. 在计算中, 该剪切力为碳管上所有碳原子所受到的剪切力的总和. 图 2 给出的是界面剪切应力在不同滑动速度下随着碳管位移的变化, 从图中可以看出, 整个滑动过程中界面剪切应力的变化主要可以分为三个阶段: 1) 线性增长阶段, 此阶段为弹性响应阶段, 碳管与界面处的聚乙烯分子没有相对运动, 界面处的分子链随着碳管一起移动, 直到剪切应力增大到一个临界点, 即临界面剪切应力 (CISS); 2) 屈服阶段, 达到临界剪切应力之后, 聚乙烯分子与碳管之间开始发生滑动, 剪应力迅速下降并发生不规则振荡; 3) 稳定滑动阶段 (或稳定波动阶段), 屈服阶段之后, 碳管与聚乙烯分子之间保持稳定的滑动速度, 界面剪切应力也趋于稳定波动阶段. 在稳定滑动阶段中, 界面剪切应力会出现周期性波动, 且波动周期与碳纳米管的轴向结构周期一致, 如图 2 所示. 因此, 碳管壁面的周期结构是导致界面剪切应力周期性波动的原因 [28], 即随着碳管的匀速滑动, 界面处的聚乙烯分子从碳管表面的一个周期单元跳动到下一

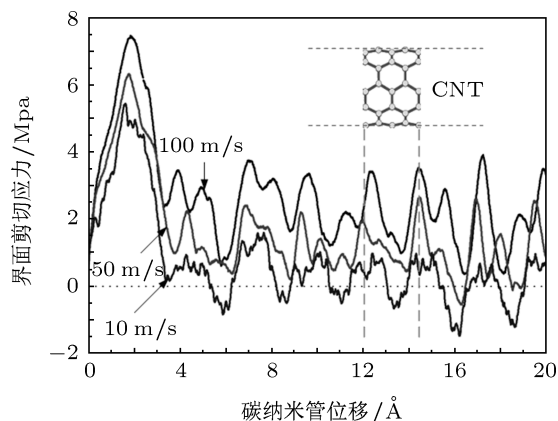


图 2 扶手椅型 (10, 10) 单壁碳纳米管在链长为 200 mpc、分子数为 100 的无定形聚乙烯中以不同的运动速度滑动时, 碳纳米管 - 聚乙烯界面剪切应力随着碳纳米管位移的变化关系

个周期单元. 界面滑移剪切应力 (SISS) 是整个稳定滑动阶段的界面剪应力平均值, 从图 2 中可以看出界面临界剪切应力和滑移剪切应力都随着碳纳米管滑移速度的升高而增大.

为了进一步探索界面剪切应力的变化机理, 以碳纳米管以 10 m/s 的速度在聚乙烯中滑动的过程为例, 图 3 中给出了碳纳米管在聚乙烯内整个滑移过程中的各种势能 (即方程 (1) 中四种势能形式) 的变化. 从图中明显可以看出, 只有界面势能 E_{int} 在出现相对滑动之前逐渐升高, 而进入稳定滑动过程之后保持在一个稳定值, 而其他描述聚乙烯的几种势能没有明显变化. 这说明本模拟系统中对复合材料界面响应起支配作用的是碳纳米管和聚乙烯之间的范德华力的作用.

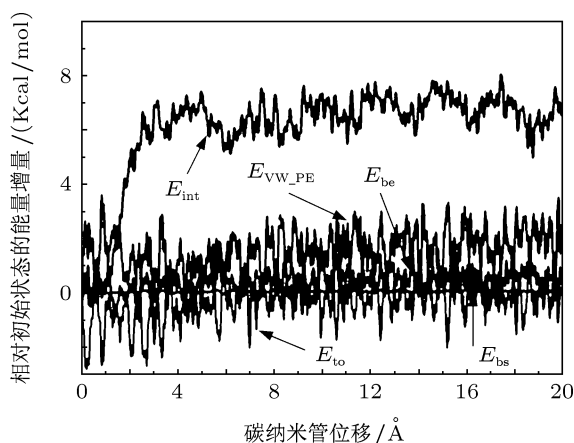


图 3 扶手椅型 (10, 10) 单壁碳纳米管在链长为 200 mpc、分子数为 100 的无定形聚乙烯中以 10 m/s 速度滑动时, 各种势能相对于初始平衡态的能量增量随着碳纳米管位移的变化关系

3.2 聚乙烯分子链链长的影响

为了探索聚乙烯分子链长对碳纳米管 - 聚乙烯复合材料界面剪切应力的影响, 我们分别对链长为 100 mpc, 200 mpc 和 300 mpc 的情况下碳管在其内部匀速滑动的界面剪切应力变化进行分析. 为了首先消除系统模拟尺寸效应的影响, 我们保持聚乙烯中总的单体数目 100000 不变, 所以三种情况下分子链数目分别为 1000, 500 和 333. 此外, 为了保证我们得出的结果独立于无定形聚乙烯的初始分子排布, 我们对于每一种情况在不同初始排布情况下执行三次分子动力学模拟, 然后对三次的模拟结果进行平均. 结果发现, 界面临界剪切应力和滑移剪切应力都随着链长的增长而增大, 只是临界剪切

应力的增大程度较滑移剪切应力增大程度明显, 如图 4 所示. 链长增长导致界面剪切应力增大的原因是由于较长的聚乙烯分子链会导致更加复杂的分子链缠绕, 即每个分子链将会与更多的分子链缠绕, 这样会导致无定形聚乙烯材料本身的硬度增强, 所以界面剪切应力也随之增大. 该结果与 Hossain 等人 [29] 的分子动力学模拟结果一致.

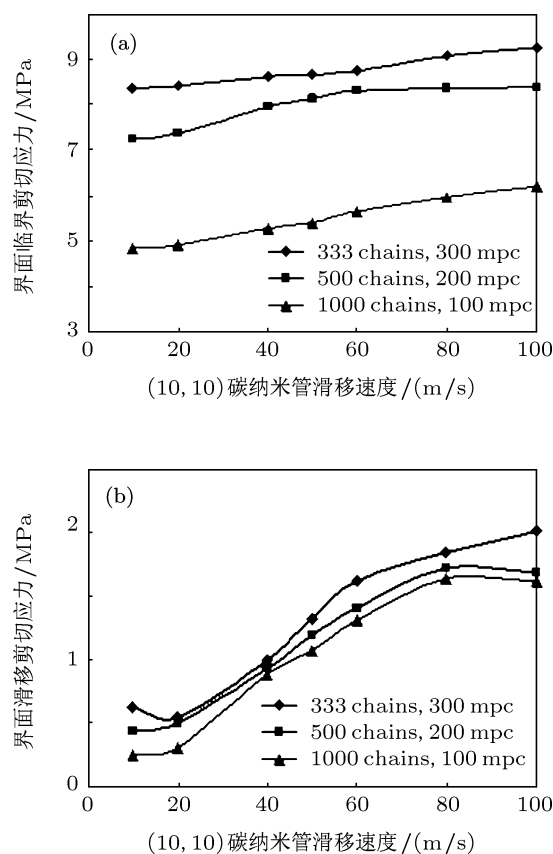


图 4 保持聚乙烯的总单体数目不变, 不同链长情况下, 扶手椅型 (10,10) 单壁碳纳米管在聚乙烯中滑动时的 (a) 界面临界剪切应力和 (b) 界面滑移剪切应力与碳管滑移速度之间的变化关系. N chains M mpc 表示 N 条聚乙烯分子链, 每条分子链中的单体数目为 M , mpc 表示每条分子链上的单体数 (monomer per chain)

3.3 碳纳米管管径的影响

为了研究碳纳米管管径对碳管 - 聚乙烯复合材料界面剪切应力的影响, 我们分别采用扶手椅型 (5,5), (8,8), (10,10) 和 (15, 15) 单壁碳纳米管嵌入到链长为 100 mpc 的无定形聚乙烯中, 并在不同的滑动速度下研究了界面临界剪切应力和滑移剪切应力的变化. 图 5(a) 和 (b) 分别展示了不同碳管管径情况下界面滑移剪切应力和界面临界剪切应力

随着碳纳米管滑移速度的变化. 结果发现, 界面临界剪切应力和滑移剪切应力都随着碳纳米管管径的减小而增大, 不同的是, 界面临界剪切应力随着碳管滑移速度的增大而近似线性增大, 而界面滑移剪切应力随着碳管滑移速度的增大而非线性增加并最终达到一个稳定值. 图中为了获得较为准确的结果, 每个数据点都是执行 5 次分子动力学模拟结果的统计平均值. 为了继续探索该复合材料界面剪切应力的最小值, 我们取了碳管管径为无穷大的情况, 即单层石墨片嵌入到该无定形聚乙烯中进行滑动的界面剪切应力大小, 如图 5 所示, 界面临界剪切应力远小于 (15,15) 单壁管的情况而界面滑移剪切应力只在较高速滑移情况下明显小于 (15,15) 单壁管的情况.

为了继续探讨碳管管径影响下的界面剪切应力的变化机理, 我们画出了不同管径情况下碳纳米管上的单个碳原子与聚乙烯分子发生相互作用范围的示意图, 如图 6 所示. 如前面提到的界面剪切应力的计算方法是 $\tau_{ISS} = F_{CNT}/A_{int}$ (A_{int} 为碳纳米管的外表面积), 对于碳管上的单个碳原子而言, 所占有的表面积是一个常数且不依赖于碳纳米管管径, 所以界面剪切应力与每个碳原子上所受到的剪切力成正比, 而该剪切力正比于经历相同位移情况下的界面相互作用能, 因此, 界面剪切应力正比于碳管上单个碳原子与聚乙烯分子的相互作用能. 从图 6 中可以看出, 随着碳纳米管管径的增大, 图中标出的碳原子与聚乙烯相互作用的区域逐渐减

小, 即相互作用势能在逐渐减小, 所以界面剪切应力随着碳管管径的增大而逐渐减小.

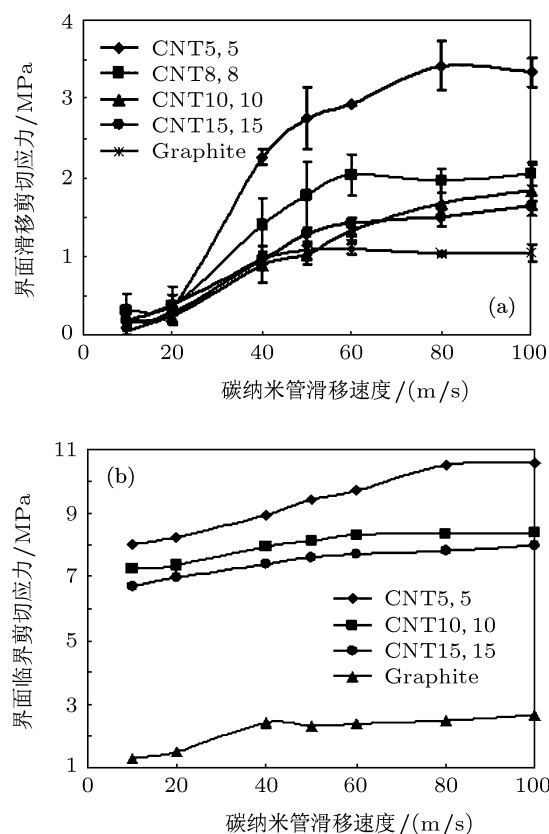


图 5 碳纳米管管径从 (5,5), (8,8), (10,10) 增大到 (15,15), 甚至到管径极限大的情况 — 碳片层 (Graphite) 在无定形聚乙烯 (100chains 200 mpc) 中滑动时, (a) 界面滑移剪切应力和 (b) 界面临界剪切应力与碳管滑移速度之间的变化关系. 图中 CNTn, n 表示 (n, n) 碳纳米管

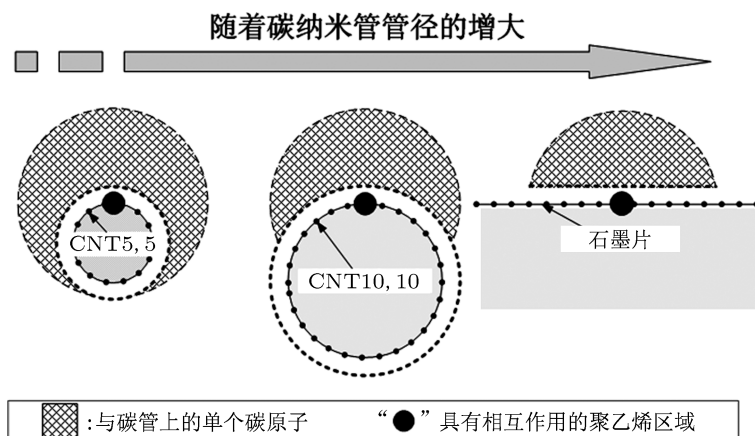


图 6 不同碳管管径情况下, 碳纳米管上的碳原子与聚乙烯作用区域示意图

4 结论

本文针对碳纳米管-无定形聚乙烯复合材料的界面力学特性进行了分子动力学计算和分析. 通过对单壁碳纳米管从无定形聚乙烯中抽出过程的模拟, 研究了碳纳米管滑移速度、聚乙烯分子链长和碳纳米管管径对界面临界剪切应力和滑移剪切应力影响, 并从势能变化的角度对界面的滑移机理进行了分析. 结果发现, 随着聚合物分子链长的增加, 界面临界剪切应力有显著增大, 而滑移剪切应力略

显增加, 原因在于链长的增加所引起的更多的聚乙烯分子链缠绕导致无定形聚乙烯力学性能有了明显增强. 界面临界剪切应力和滑移剪切应力随着碳纳米管管径的增大而明显增加, 并从碳原子与聚乙烯分子之间的相互作用角度分析了碳管管径对界面剪切应力的影响机理. 虽然本文的模拟结果提高了对碳纳米管-聚乙烯复合材料的界面载荷传递机理的认识, 但是本文所得到的结果和结论还有必要在将来的实验工作中进一步验证.

- [1] Lau K T, Hui D 2002 *Compos. B* **33** 263
- [2] Sun J P, Weng J B, Huang X Z, Ma L P 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 6523 (in Chinese) [孙建平, 翁家宝, 黄小珠, 马琳璞 2009 物理学报 **58** 6523]
- [3] Wang J L, Xiong G P, Gu M, Zhang X, Liang J 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 4536 (in Chinese) [王建立, 熊国平, 顾明, 张兴, 梁吉 2009 物理学报 **58** 4536]
- [4] Schadler L S, Giannaris S C, Ajayan P M 1998 *Appl. Phys. Lett.* **73** 3842
- [5] Shaffer M S P, Windle A H 1999 *Adv. Mater.* **11** 937
- [6] Gong X, Liu J, Baskaran S, Voise R D, Young J S 2000 *Chem. Mater.* **12** 1049
- [7] Haggenueller R, Gommans H H, Rinzler A G, Fischer J E, Winey K I 2000 *Chem. Phys. Lett.* **330** 219
- [8] Qian D, Dichey E C, Andrews R, Rantell T 2000 *Appl. Phys. Lett.* **76** 2868
- [9] Piggott M R 1995 *Composites Sci. Techn.* **55** 269
- [10] Bechel V T, Sottos N R 1998 *Composites Sci. Techn.* **58** 1727
- [11] Thostenson E T, Ren Z F, Chou T W 2001 *Composites Sci. Techn.* **61** 1899
- [12] Ajayan P M, Schadler L S, Giannaris C, Rubio A 2000 *Adv. Mater.* **12** 750
- [13] Zheng Q Z, Xue Q Z, Yan K Y, Gao X L, Li Q, Hao L Z 2008 *Polymer* **49** 800
- [14] Al-Haik M, Hussaini M Y 2005 *J. Appl. Phys.* **97** 074306
- [15] Lordi V, Yao N 2000 *J. Mater. Res.* **15** 2770
- [16] Liao K, Li S 2001 *Appl. Phys. Lett.* **79** 4225
- [17] Frankland S J V, Caglar A, Brenner D W, Griebel M 2002 *J. Phys. Chem. B* **106** 3046
- [18] Frankland S J V, Harik V M 2003 *Surf. Sci.* **525** L103
- [19] Chowdhury S C, Okabe T 2007 *Composites. A* **38** 747
- [20] Liu Y J, Nishimura N, Qian D, Adachi N, Otani Y, Mokashi V 2008 *Engineering Analysis with Boundary Elements* **32** 299
- [21] Gou J H, Minaie B, Wang B, Liang Z Y, Zhang C 2004 *Computational Materials Science* **31** 225
- [22] Wei C Y 2006 *Applied Physics Letters* **88** 093108
- [23] Plimpton S 1995 *J. Comp. Phys.* **117** 1
- [24] Liao K, Li S 2001 *Applied Physics Letters* **79** 4225
- [25] Kuwajima S, Noma H, Ohsaka T 1994 *Proceedings of the fourth symposium of the society of computer chemistry, Japan* 53
- [26] Allen M P, Tildesley D J 1987 *Computer simulation of liquids* (Clarendon Press)
- [27] Shepherd J E 2006 *Dissertation* (Georgia Institute of Technology) p39
- [28] Gourdon D, Israelachvili J N 2003 *Physical Review E* **68** 021602
- [29] Hossain D, Tschopp M A, Ward D K, Bouvard J L, Wang P, Horstemeyer M F 2010 *Polymer* **51** 6071

Analysis of interfacial mechanical properties of carbon nanotube–polymer composite*

Zhang Zhong-Qiang^{1)†} Cheng Guang-Gui¹⁾ Liu Zhen²⁾ Xue Yi-Bin³⁾
Ding Jian-Ning¹⁾ Ling Zhi-Yong¹⁾

1) (*Micro/Nano Science and Technology Center, Jiangsu University, Zhenjiang 212013, China*)

2) (*School of Naval Architecture and Ocean Engineering, Jiangsu University of Science and Technology, Zhenjiang 212003, China*)

3) (*Department of Mechanical and Aerospace Engineering, Utah State University, Logan, UT 84322*)

(Received 7 September 2011; revised manuscript received 30 October 2011)

Abstract

In this paper, the interfacial mechanical properties of carbon nanotube-polyethylene (CNT-PE) composite are investigated by using classical molecular dynamics simulation. Based on the simulations for the CNT pulling-out process from the PE, the influences of the CNT sliding velocity, the chain length of PE and the radius of CNT on the interfacial shear stress are explored. As the chain length of PE increases, the critical interfacial shear stress increases remarkably while the sliding shear stress increases slightly. Both the critical shear stress and the sliding shear stress increase with the radius of CNT enlarging. Moreover, the mechanism for the variation of interfacial shear stress is analyzed and discussed.

Keywords: carbon nanotube, polyethylene, molecular dynamics, interfacial mechanical property

PACS: 62.25.+g, 68.35.-p, 02.70.-c, 61.46.-w

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11102074, 51005103), the Natural Science Foundation of Jiangsu Province (Grant No. BK2011463), and the initial funding of Jiangsu University (Grant No. 11JDG024).

† E-mail: zhangzq@ujs.edu.cn