

石墨烯增强铝基纳米复合材料扭转载荷下的 微观变形行为*

李如峰¹⁾ 李多生^{1)2)†} 叶寅¹⁾ 余欣秀¹⁾
岛洋洋¹⁾ 江五贵¹⁾ 秦庆华³⁾

1) (南昌航空大学材料科学与工程学院, 南昌 330063)

2) (轻质航空先进材料研究所, 南昌 330063)

3) (深圳北理莫斯科大学前沿交叉技术研究院, 深圳 518172)

(2025 年 10 月 10 日收到; 2025 年 12 月 12 日收到修改稿)

采用分子动力学模拟, 构建纯铝及含 0.5%(体积分数)的 1—3 层石墨烯 0°, 90°嵌入的石墨烯增强铝基纳米复合材料 (Gr/Al nanocomposites) 的 7 种模型, 探究 Gr/Al 纳米复合材料扭转载荷下微观变形行为. 仿真结果表明, 石墨烯显著影响铝基的扭转力学响应: 石墨烯通过机械互锁与电子-声子耦合降低体系势能、平缓动能, 含石墨烯的纳米复合材料体系剪切应力波动更剧烈、极值更大; 0°嵌入时随层数增加影响更显著, 3 层石墨烯 0°嵌入 (3-Gr-0°) 在 540°—610°附近应力极端值突出, 表明 3-Gr-0°可承受更大的扭转载荷. 进一步研究发现, 3-Gr-0°中石墨烯对铝原子近短程和长程有序性的破坏作用更明显, 阻碍位错传播, 使初始位错角度增大, 位错类型仍以 Shockly 为主. 本研究为该类复合材料结构设计 with 性能优化提供理论参考.

关键词: 石墨烯, 铝基纳米复合材料, 分子动力学, 扭转模拟

DOI: 10.7498/aps.75.20251374

CSTR: 32037.14.aps.75.20251374

1 引言

铝及铝合金因其轻量化程度高、可再加工性强等特点被广泛应用于航天航空、汽车制造和半导体等领域, 被誉为最有前途的结构材料之一^[1]. 与此同时, 对制备兼具优异力学性能和功能特性的结构材料的追求, 推动了二维材料与金属材料复合的广泛研究^[2-4]. 石墨烯 (graphene, Gr) 作为一种由碳原子 sp^2 杂化形成的六元环蜂窝状二维材料, 具有大的比表面积和优异的力学性能, 可以与金属材料实现界面强结合, 被认为是金属基复合材料 (metal matrix composites, MMCs) 理想的增强材料^[5-7].

二维层状石墨烯与铝的复合, 理论上能较好实现金属材料的轻量化、高性能, 在工程应用上展现更优异的延展性和耐蚀性等特点^[8].

众多研究表明, 石墨烯是传递并承受基体载荷来实现复合材料的增强^[9]. 石墨烯与铝基体的界面结构是承受载荷的重要结构, 界面结合强的 Gr/Al 界面更有益于纳米复合材料的力学性能提升. Yu 等^[10]与 Chen 等^[11]开展了石墨烯纳米片以及碳纳米管增强金属基复合材料的制备研究, 发现当复合材料中界面结合强度较弱时, 石墨烯会从金属基体中发生分层现象, 并且在界面区域会伴随缺陷的形成, 这种微观结构的演化最终会导致材料整体失效. 从实际应用角度来看, 石墨烯作为增强相, 不仅能通

* 国家自然科学基金 (批准号: 51562027, 12062016)、江西省重点研发计划重点项目 (批准号: 20201BBE51001)、江苏省重点研发计划 (产业前瞻与关键核心技术) (批准号: BE2021055) 和南昌航空大学现代信息中心高性能计算服务平台资助的课题.

† 通信作者. E-mail: duosheng.li@nchu.edu.cn

过自身特性直接影响复合材料的力学性能,还可以在金属变形过程中改变其微观结构的演化路径,进而对材料的宏观性能产生调控作用。

迄今,研究人员已广泛展开石墨烯增强铝基(graphene/aluminum), Gr/Al 纳米复合材料(nanocomposites)的相关研究,为获得性能更佳的石墨烯-铝复合材料^[12-15],许多研究工作开始深入探究原子尺度的变形与性能强化机制之间的关系。Qiu等^[16]通过分子动力学(molecular dynamics, MD)模拟,研究烧结温度和铝颗粒尺寸对致密化的影响,结果显示,更高的烧结温度和更小的颗粒尺寸有利于 Gr/Al 复合材料的烧结质量提升。明知非等^[17]发现当 Gr 嵌入高度较小时,增强体下方的镁基体塑性变形能力强,容易发生位错滑移,而 Gr 嵌入高度较大时,石墨烯上下两边的两部分镁基体的塑性变形能力相当。Ou等^[18]采用 MD 探索钛-石墨烯界面的热导率,发现热边界电导率随着层数增加而下降,并在 $n = 5$ 时达到平台。Li等^[19]通过分子动力学研究表明,孪晶界和石墨烯的协同作用使铝基复合材料在塑性阶段产生二次增强,从而提高了铝基复合材料的强度和韧性。Geng等^[20]通过等离子体辅助球磨实现的界面纳米结构设计方法,用于制备兼具超高强度和良好塑性的无序多层石墨烯/铜复合材料,其压缩强度达到 1.56 GPa,塑性应变超过 0.6。Das和Kumar^[21]通过 MD 研究估算了铝-石墨烯核壳纳米复合材料的力学性能,在不同的实验条件下,杨氏模量 E 由 172.2928 GPa 变为 4.1567 TPa,体积模量 K 由 0.7651 TPa 变为 38.1252 TPa,泊松比 μ 由 0.33 变为 0.49,刚性模量 G 由 53.208 GPa 变为 1.4433 TPa。Guo等^[22]将 0.5% 石墨烯纳米片(GPN)加入铝合金粉末中制备复合材料,发现复合材料屈服强度较基体提升了 37.5%,拉伸强度提升了 62.9%。且发现,随石墨烯含量的增大,复合材料的抗拉强度降低。Azizi等^[23]通过热挤压成功制备 0.5% 石墨烯增强铝基复合材料,发现其抗拉强度较基体提升 141%,电导率提高了 2%。

与实验研究相比,数值模拟在呈现纳米复合材料中基体与增强体的相互作用及微观组织形貌变化方面更具优势。MD 模拟从原子角度揭示石墨烯增强铝基纳米复合材料的内部微观组织演化及位错形核过程,并可对其力学性能进行预测。Wang等^[24]研究表明,多层石墨烯可以有效地阻碍位错

传播,显著提升复合材料的刚度与强度。Zhu等^[25]借助 MD 模拟,探究了 Gr/Al 复合材料在单轴压缩载荷作用下的微观形貌变形特征及石墨烯的强韧化原理,同时分析了石墨烯因位错阻挡效应产生的增强作用。Peng和Sun^[26]则系统研究了石墨烯的手性及层间厚度对多层石墨烯/碳纳米管力学性能与位错演化的影响,还探讨了铜基复合材料的单轴拉伸力学性能。

目前,研究人员对固定体积分数下石墨烯增强铝基纳米复合材料扭转载荷下的微观机制理解尚浅。本文通过分子动力学模拟,探究相同体积分数下石墨烯增强铝基纳米复合材料在扭转载荷中的微观变形行为,研究了不同石墨烯堆叠层数、嵌入角度对增强铝基复合材料的扭转变形的影响,在原子尺度上简单阐述原子结构演变、位错转变及层错形成的原理,为石墨烯增强金属基纳米复合材料的原子结构演化和位错动力学的研究提供参考。

2 模型建立和势函数选择

本文是使用开源大规模原子/分子大规模并行模拟器(LAMMPS)^[27-30]对 Gr/Al 纳米复合材料进行分子动力学模拟。首先,在 x, y, z 三个方向 [100], [010], [001] 上设置非周期性边界条件^[31],建立直径为 120 Å,标距 320 Å,平行长度 560 Å,模型夹头长度各 20 Å,总长为 600 Å 的圆柱形模型,选择体积分数为 0.5% Gr/Al,分别建立石墨烯堆叠层嵌入基体如图 1 所示 7 个模型。图 1(a) 为纯铝(pure-Al);图 1(b)—(d) 分别为扭转方向成 0° 的单层、双层、三层石墨烯增强铝基纳米复合材料模型,标记为 n -Gr-0° ($n = 1, 2, 3$);图 1(e)—(g) 扭转方向成 90° 的单层、双层、三层石墨烯增强铝基纳米复合材料模型,标记为 n -Gr-90° ($n = 1, 2, 3$),图 1 中箭头表示扭转方向。对模型通过共轭梯度算法^[32],进行几何结构的优化,设定能量容差为 1×10^{-15} eV,力的容差为 1×10^{-15} eV/Å。然后设置在 0 GPa 恒压、300 K 恒温下进行 40 ps 的结构弛豫。

力场在 MD 模拟中至关重要,金属原子之间通常使用嵌入原子模型(EAM)势^[33],本文中 Al-Al 原子间的相互作用使用 Mendeleev^[33]研发的 EAM 势描述,可以准确呈现结晶过程中 Al 原子之间的相互作用。采用自适应分子间反应经验键级(AIREBO)^[34]势描述石墨烯内的原子间相互作用,AIREBO 势

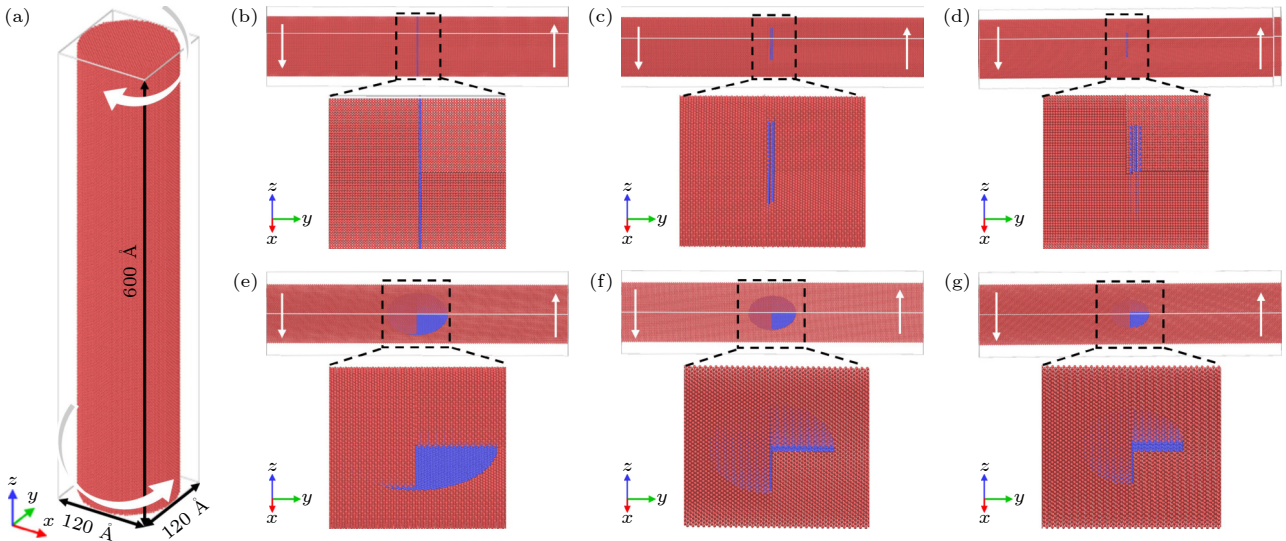


图1 Pure-Al与Gr/Al纳米复合材料的7种模型 (a) Pure-Al; (b) 1-Gr-0°; (c) 2-Gr-0°; (d) 3-Gr-0°; (e) 1-Gr-90°; (f) 2-Gr-90°; (g) 3-Gr-90°
 Fig. 1. Seven models of pure-Al and Gr/Al nanocomposites: (a) Pure-Al; (b) 1-Gr-0°; (c) 2-Gr-0°; (d) 3-Gr-0°; (e) 1-Gr-90°; (f) 2-Gr-90°; (g) 3-Gr-90°.

因其能准确地描述碳-碳原子之间的共价键而被广泛用于碳纳米材料研究,特别是石墨烯和碳纳米管.此外,Al-Gr界面原子的非键相互作用选用Lennard-Jones(LJ)势^[35]建模,Al-Gr界面的参数设定为 $\epsilon = 0.0351$ eV和 $\sigma = 3.0135$ Å.模拟在等温等压条件下进行,使用开放式可视化工具(OVITO)^[36]来观察原子构型,进行具有自适应截止距离的公共邻居分析(CNA)^[37],精确识别微观结构的变化,例如面心立方(FCC)、密排六方(HCP)、正二十面体(ICO)等.径向分布函数(RDF)^[38]是表征固体非晶态和晶态结构特征的常用有效方法之一.RDF描述了发现一个原子的可能性,其是距离平均中心原子的距离 r 的函数.并且采用位错提取算法(DXA)^[39],对加载过程中的位错特征进行分析.

3 模拟结果及分析

3.1 Gr/Al 纳米复合材料扭转应力分析

为探究Gr/Al纳米复合材料在扭转作用下的力学行为,现将图1中7种模型进行扭转.图2为7个模型的扭转应力曲线.图2(a), (b)为嵌入石墨烯方向与扭转方向平行的切应力图,图2(c), (d)为嵌入石墨烯方向与扭转方向呈90°的切应力图.可以发现,不同体系剪切应力均随扭转角呈现周期性波动,尤其是含石墨烯嵌入1层(1-Gr)、3层(3-Gr)波动更剧烈,极值更大,说明石墨烯影响铝基材料扭转力学响应.增强体嵌入角度与应力方向影响显

著,在嵌入角度0°和90°下, xy 和 yz 应力变化规律不同,这反映出材料的各向异性.

相比较而言,pure-Al各个方向的剪切应力波动相对较为平缓,极值幅度较小,这可能是因为内部仅存在铝原子,原子与原子间受力传递、相互作用的剧烈程度相对较低,在扭转时力学响应相对稳定.图2(a), (b)中,1-Gr应力波动幅度较大,出现明显高峰值在扭转角430°左右,说明添加1层与扭转方向平行的石墨烯后,材料内部应力集中、力学相互作用显著增强.这可能是石墨烯与铝基体协同作用,导致界面效应在该角度范围凸显.2-Gr应力变化较为复杂,不同扭转阶段有不同表现,但整体波动幅度介于1-Gr和3-Gr之间.图2(a)—(d)中,3-Gr均有极低的负峰值和较高正峰值,嵌入0°时峰值出现在扭转角540°—610°附近,嵌入90°时峰值扭转角度低于500°,应力波动且极端值突出.仿真结果发现3层石墨烯存在时,材料在扭转过程中内部结构相互作用更易出现强烈应力集中,这可能是因为多层石墨烯的堆积使Gr-Al界面面积增大,在扭转变形下,应力传递、协调变形更困难,且原子结构类型的差异使得位错移动困难,形成位错塞积,从而引发大幅度应力波动.

扭转模拟发现,Gr/Al纳米复合材料在特定扭转角度下,能承受更高的剪切应力,尤其是3-Gr-0°可承受更大的扭转载荷.这说明在对应受力状态下,含Gr复合材料可以承受更大的外力而不发生破坏,适用于需要承受较大扭转载荷的结构部件.

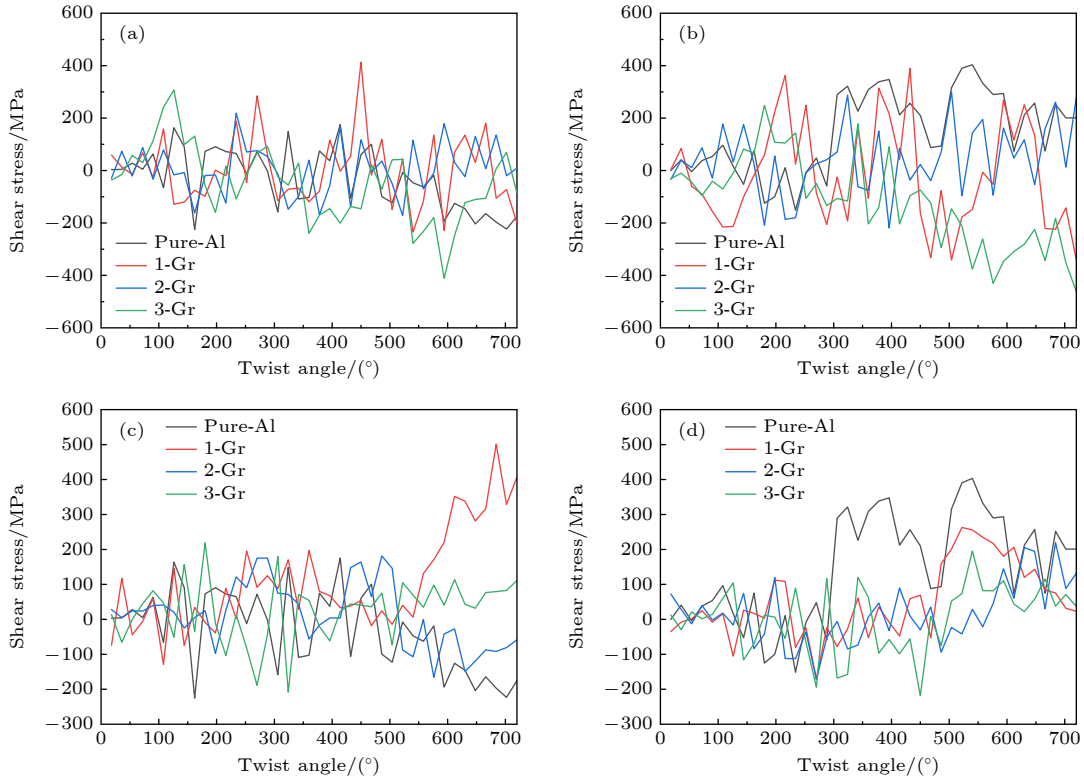


图 2 Gr/Al 纳米复合材料模拟扭转角度-切应力曲线 (a) 扭转方向与增强体呈 0° 复合材料的 xy 切应力; (b) 扭转方向与增强体呈 0° 复合材料的 yz 切应力; (c) 扭转方向与增强体呈 90° 复合材料的 xy 切应力; (d) 扭转方向与增强体呈 90° 复合材料的 yz 切应力
 Fig. 2. Simulated torsion angle-shear stress curves for Gr/Al nanocomposites: (a) xy shear stress of the composite with a 0° angle between the torsion direction and the reinforcement; (b) yz shear stress of the composite with a 0° angle between the torsion direction and the reinforcement; (c) xy shear stress of the composite with a 90° angle between the torsion direction and the reinforcement; (d) yz shear stress of the composite with a 90° angle between the torsion direction and the reinforcement.

3.2 Gr/Al 纳米复合材料扭转能量分析

图 3 为纯铝及 Gr/Al 纳米复合材料扭转模拟的内部动能曲线. 可以发现, 纯铝及 Gr/Al 纳米复合材料在扭转过程中, 动能均随扭转角度增大呈现明显的周期性波动.

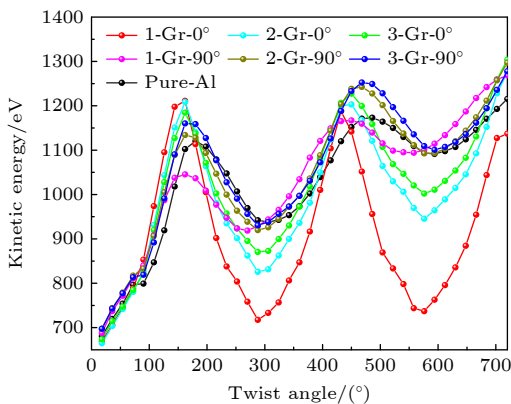


图 3 Gr/Al 纳米复合材料扭转模拟动能曲线

Fig. 3. Simulated torsional kinetic energy curves of Gr/Al nanocomposites.

相较于纯铝, 嵌入 Gr 的纳米复合材料的整体动能水平与波动幅度均明显增加. 由图 3 可见, 2-Gr- 0° 在某些扭转角度区间, 动能低于 pure-Al, 3-Gr- 0° 的扭转动能波动相较于 1-Gr- 0° 更加平缓. 这是因为石墨烯的嵌入影响铝基体原子的运动环境, 石墨烯的二维平面结构对铝原子的运动具有一定的空间限制作用, 石墨烯平面的存在, 使铝原子在垂直于石墨烯平面方向上的运动受到约束, 石墨烯原子与铝原子间产生机械互锁作用, 限制了原子的无序运动, 使原子运动的无序性、剧烈程度降低, 动能变化逐渐趋于平缓; 且随嵌入 Gr 层数的增加, 更多的平面参与对铝原子运动的约束, 铝原子运动的自由度进一步降低, 动能波动变得更平缓, 说明更多的 Gr-Al 界面能更有效地引导原子运动, 使体系中原子运动状态更有序, 动能曲线随层数增加而呈现出更规律、幅度更小的波动特征^[40]. 随扭转角度的增大动能波动趋于平缓, 材料的扭转振动系统从不稳定的受激状态逐步过渡为稳定的平稳运行状态, 材料内部能量体系逐步趋于稳定.

嵌入 90° 石墨烯体系的纳米复合材料动能曲线波动形态与嵌入 0° 石墨烯不同. 同一石墨烯层数下, 90° 取向的动能在部分扭转角区间更高. 这可能是因为石墨烯取向影响了原子运动的状态, 0° 取向时石墨烯对原子运动的约束、协同作用更有利于降低原子动能的波动和绝对水平. 同时, 石墨烯层数增加对动能的影响在 90° 体系中也存在. 随层数的增加, 这种对原子运动的调控作用增强, 动能曲线的波动幅度进一步减小, 与 0° 取向体系类似, 说明层数对原子运动的调控在不同取向下具有共性.

此外, 石墨烯本身电子结构独特, 其电子具有高迁移率等特性, 使得铝基纳米复合材料随石墨烯的嵌入, Gr-Al 界面处的电子-声子耦合与纯铝明显不同. 当铝原子扭转振动时, 会产生声子, 在纳米复合材料中, 石墨烯界面处的电子-声子耦合会改变声子的传播特性^[40]. 扭转过程中, 铝原子振动加剧, 从而产生更多声子, 石墨烯通过电子-声子耦合吸收部分声子能量, 抑制了铝原子动能的过度增加, 使得复合材料的动能降低. 随着石墨烯层数增加, 电子-声子耦合的作用范围扩大, 对铝原子动能的调节作用更显著, 进一步降低了动能的幅度.

纯铝没有石墨烯界面的调控, 原子的动能波动大, 反映出其原子运动受扭转影响更显著, 原子运动的无序性和不确定性更高, 体现了石墨烯对铝基纳米基体的动力学性能优化, 通过界面效应改善原子运动状态, 进而可影响材料的力学、热学等宏观性能.

图 4 为 Gr/Al 纳米复合材料扭转模拟的势能变化. 纯铝势能曲线整体处于较高的位置, 具有较高的相对势能. 这是因为纯铝在扭转过程中, 打破了原子原有的平衡位置, 致使势能快速变化. 随扭转的进行, Al 基体通过位错进行结构调整, 势能逐渐趋于稳定, 进而达到新的相对平衡状态. 由图 4 可见, 石墨烯的引入显著降低了纳米复合材料的势能, 这可能是因为石墨烯与铝基复合时, 铝原子与石墨烯表面的碳原子之间会产生一定的相互作用力^[41]. 这种力不同于铝原子之间的金属键, 是由于碳原子的电负性与铝原子不同, 电子云会在界面处发生一定程度的重新分布, 且排列的相对更为有序, 能够更有效地优化原子间的距离和角度, 使得体系中原子间的排斥和吸引达到更好的平衡状态, 从而降低体系的势能. 这种优化在 0° 取向时比 90° 更明显, 说明扭转方向与石墨烯嵌入的角度能够影响界面作用的强弱, 合适的扭转方向或是增强体嵌入角度可更好地降低体系势能.

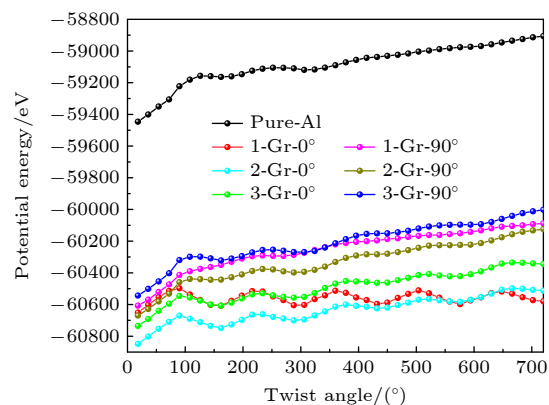


图 4 Gr/Al 纳米复合材料扭转模拟势能曲线

Fig. 4. Simulated torsional potential energy curves of Gr/Al nanocomposites.

同时, 石墨烯层数的增加, 体系势能进一步降低, 多层石墨烯促使铝基体原子重新排列, 使更多的碳原子与铝原子产生相互作用, 原子间相互作用的优化范围扩大, 使得层数越多, 界面效应越显著, 体系越趋于低能稳定状态. 而纯铝由于缺乏石墨烯的界面优化作用, 势能相对较高, 且在扭转时势能变化更加剧烈, 这反映出纯铝自身原子结构在面对扭转变形时, 原子间相互作用的调整更困难, 体系稳定性对扭转更敏感.

纳米复合材料受到外界扭转作用时, 纯铝内部的原子间相对位移会产生应力集中, 使得势能快速上升. 引入石墨烯后, 石墨烯凭其优异的力学性能, 将扭转产生的应力能够通过界面传递到自身上, 将应力在二维平面上分散, 减少了纳米铝基中应力集中的程度^[10]. 当扭转角增大时, 铝原子间原本因位移而增大的相互排斥力, 其中部分排斥力通过界面传递给石墨烯, 使得铝原子间的相对作用力得到缓解, 体系不需要通过大幅提高势能来适应扭转带来的结构变化, 从而降低了势能随扭转角的变化幅度. 层数越多的石墨烯, 能够分散应力的面积越大, 应力分散效果越好, 体系势能变化就越平缓, 整体势能水平更低. 这种有效的应力分散效果, 使铝基纳米复合材料内部的应力集中点减少, 不易产生微裂纹, 宏观上抗拉强度、屈服强度显著提升, 甚至使基体具有更高的冲击韧性和断裂韧性.

3.3 Gr/Al 纳米复合材料扭转微观结构演变规律

径向分布函数常被用来描述原子的有序性, 函数 $g(r)$ 的大小代表了原子出现的概率^[42]. 图 5(a)–(g)

分别为纯铝及 Gr/Al 纳米复合材料的 7 个模型扭转模拟的径向分布函数图。

由图 5(a) 可见, pure-Al 在 $r = 3$ 附近有明显

的主峰, 表明在扭转初期纯铝金属原子在邻近距离高度聚集, 形成短程有序的局部结构, 扭转变形初期呈现短程有序, 长程近似无序的特征. 表 1 为

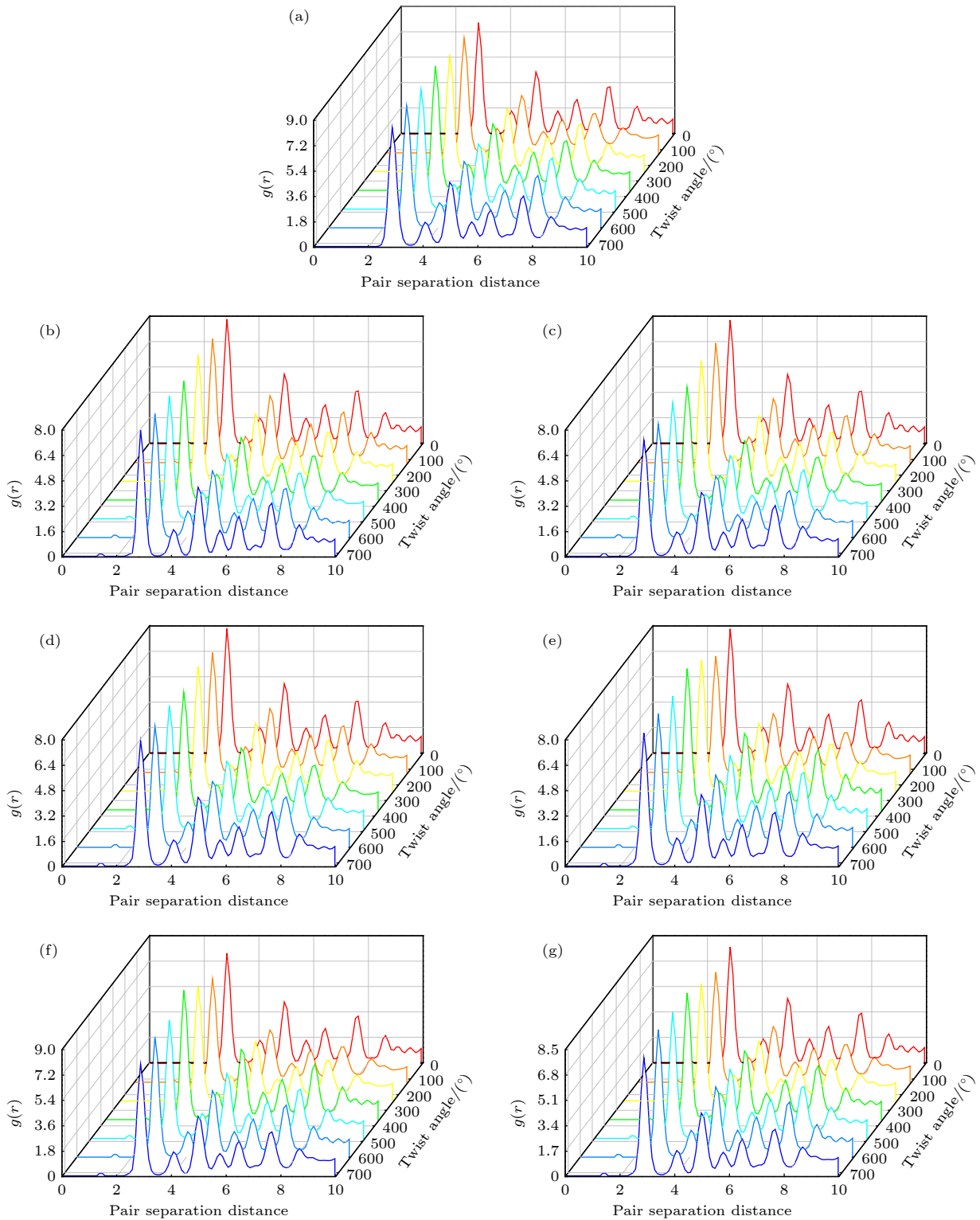


图 5 Gr/Al 纳米复合材料扭转过程径向分布函数 (a) Pure-Al; (b) 1-Gr-0°; (c) 2-Gr-0°; (d) 3-Gr-0°; (e) 1-Gr-90°; (f) 2-Gr-90°; (g) 3-Gr-90°

Fig. 5. Radial distribution functions during the torsion process of Gr/Al nanocomposites: (a) Pure-Al; (b) 1-Gr-0°; (c) 2-Gr-0°; (d) 3-Gr-0°; (e) 1-Gr-90°; (f) 2-Gr-90°; (g) 3-Gr-90°.

7种模型扭转过程中径向分布函数变化分析表. 可以发现, 随着石墨烯 0° 的嵌入, 短程 $g(r)$ 主峰高度降低、宽度增大, 破坏了铝原子的近程紧密聚集, 使近程有序度下降. 就长程而言, $g(r)$ 振荡衰减的次峰数量减少, 衰减速度增大, 这是因为石墨烯与铝原子的相互作用, 使铝原子长程有序性排列被破坏^[43]. 随着引入石墨烯层数的增加, $g(r)$ 的主峰和次峰的高度持续降低、展宽更明显, 对铝原子的调控作用更强. 结合图 5(e)—(g), 相比较于 0° 的嵌入模型, 90° 石墨烯的引入对铝原子的调控作用较弱, 铝原子的短程聚集更明显, 铝基复合材料的原子排列更为有序, 90° 取向时石墨烯对铝原子近程有序结构的破坏作用小于 0° 取向的石墨烯.

在 Gr/Al 纳米复合材料中, 石墨烯与铝基体的取向对复合材料的径向分布函数有显著影响. 90° 取向时, 铝原子的近程聚集程度更高, 长程有序性相对更好; 而 0° 取向时, 铝原子的近程和长程有序性受石墨烯的影响更大, 有序性相对较弱. 同时发现, 石墨烯 0° 和 90° 取向纳米结构中, 石墨烯含量增大时复合材料中铝原子近程和长程有序性会减弱.

表 1 扭转模型径向分布函数分析表

Table 1. Analysis table of radial distribution functions for torsional models.

材料	$g(r)$ 峰值	峰宽随扭转变化	峰值最大处扭转角度/ $^\circ$
Pure-Al	8.80	增宽	360
1-Gr- 0°	7.95	增宽	240
2-Gr- 0°	7.81	增宽	0
3-Gr- 0°	7.90	增宽	720
1-Gr- 90°	8.91	增宽	360
2-Gr- 90°	9.17	增宽	360
3-Gr- 90°	8.54	增宽	600

铝是作为面心立方结构 (FCC) 的金属, 原子与原子通过金属键实现紧密堆积. 石墨烯是由碳原子 sp^2 所形成的二维蜂窝状结构, 具有优异的机械强度和比刚度, 具备增强体所需要的特质. 图 6 为纯铝、2-Gr- 0° 及 3-Gr- 90° 扭转模拟时主变形区不同扭转角度的截面图. 如图 6(a), (e), (i) 所示, 铝原子在扭转前保持稳定的 FCC 结构, 随扭转的进行, 铝基体的晶体结构会发生转变, 纯铝晶格转变截面如图 6(b)—(d) 所示. 层状石墨烯则是由六元环组成, 石墨烯以层状嵌入铝基体后会实现复合材

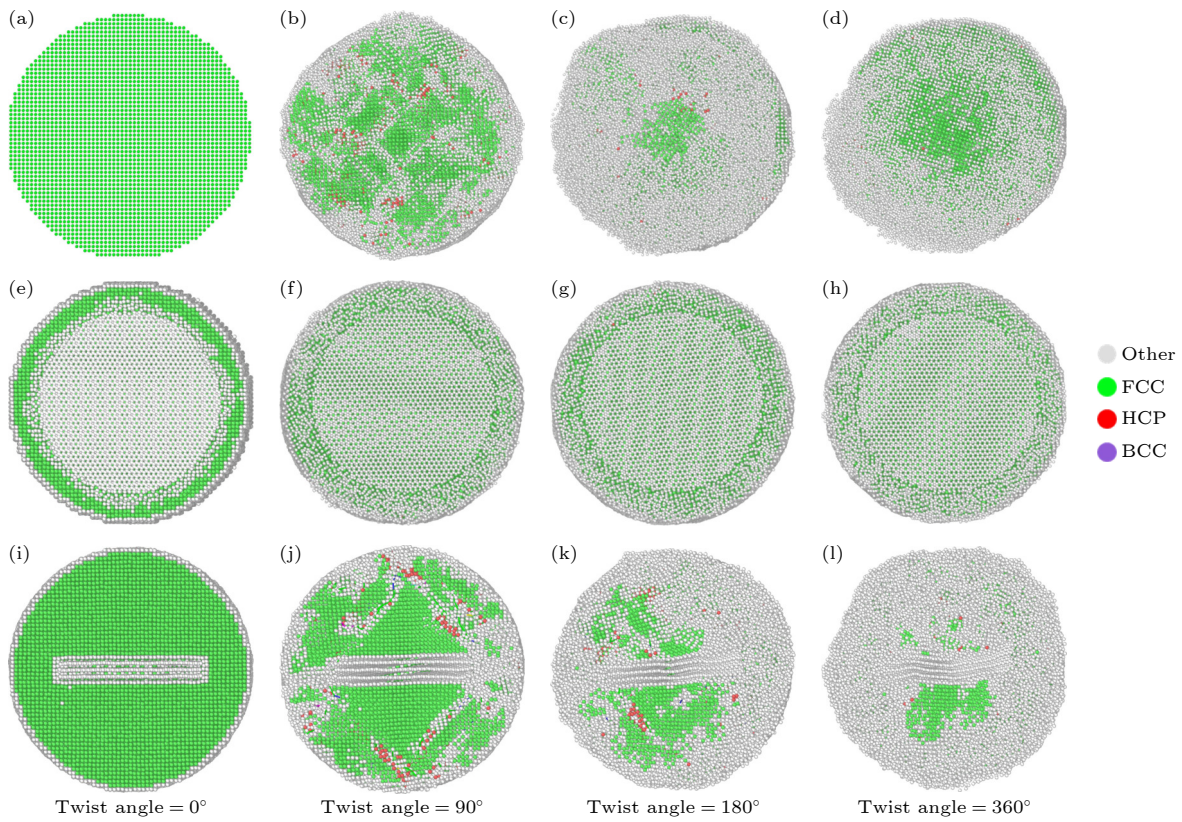


图 6 Gr/Al 纳米复合材料扭转模拟不同角度的截面图 (a)—(d) Pure-Al; (e)—(h) 2-Gr- 0° ; (i)—(l) 3-Gr- 90°

Fig. 6. Cross-sectional views of torsional simulations at different angles for Gr/Al nanocomposites: (a)—(d) pure-Al; (e)—(h) 2-Gr- 0° ; (i)—(l) 3-Gr- 90° .

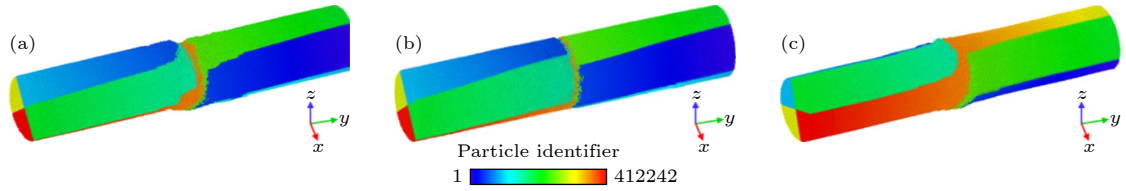


图 7 Gr/Al 纳米复合材料扭转图 (a) Pure-Al; (b) 2-Gr-0°; (c) 3-Gr-90°

Fig. 7. Torsion diagrams of Gr/Al nanocomposites: (a) Pure-Al; (b) 2-Gr-0°; (c) 3-Gr-90°.

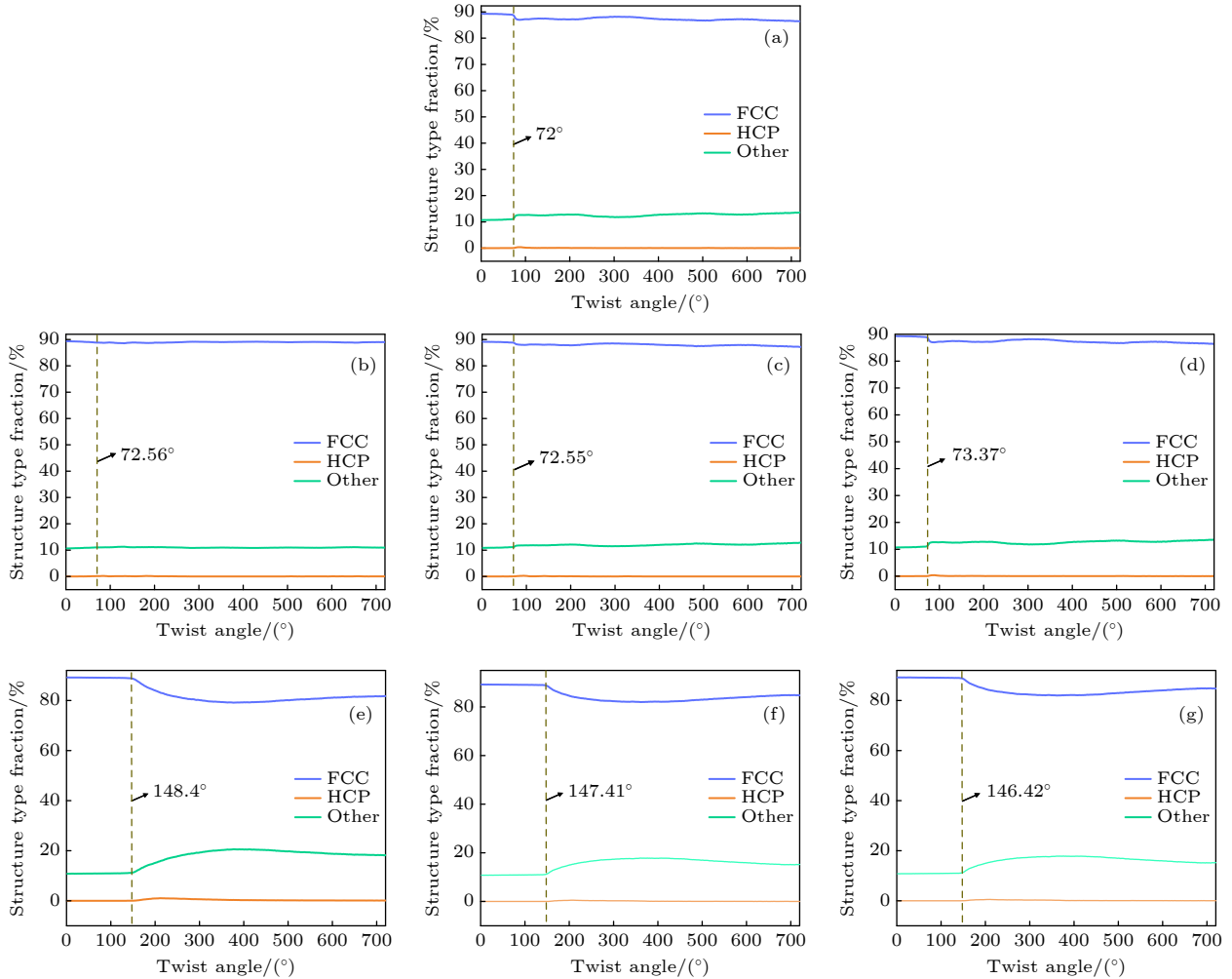


图 8 Gr/Al 纳米复合材料扭转过程晶格转变图 (a) Pure-Al; (b) 1-Gr-0°; (c) 2-Gr-0°; (d) 3-Gr-0°; (e) 1-Gr-90°; (f) 2-Gr-90°; (g) 3-Gr-90°

Fig. 8. Lattice transformation diagrams during the torsion process of Gr/Al nanocomposites: (a) Pure-Al; (b) 1-Gr-0°; (c) 2-Gr-0°; (d) 3-Gr-0°; (e) 1-Gr-90°; (f) 2-Gr-90°; (g) 3-Gr-90°.

料的多尺度异质结构, 图 6(f)–(h) 显示石墨烯 0° 嵌入扭转后模型横截面变形程度远小于纯铝, 图 6(i)–(l) 表明 3 层 90° 嵌入扭转的铝基体变形大于 0° 嵌入模型, 3 种模型扭转 360° 整体形貌如图 7 所示。

为探究嵌入角度和石墨烯层数对铝基纳米复合材料扭转时微观结构演变的影响, 对扭转过程模型的晶体结构占比进行统计。图 8 为 pure-Al 及相

同含量不同层数的 Gr/Al 纳米复合材料在扭转过程中, 面心立方 (FCC)、密排六方 (HCP) 和其他 (Other) 结构类型占比随扭转角度的变化情况。

扭转模拟过程中主要以大量 FCC、部分 Other、少量的 HCP 结构组成。图 8(a) 显示, 在 pure-Al 扭转过程中晶体结构以 FCC 为主, 结构稳定性很高, 扭转对其主要晶体结构的占比影响极小。从图 8(b)–(d) 可以发现, FCC 结构占比仍很高, HCP 占比极

低, Other 结构占比略高于纯铝, 但整体变化不大. 0° 取向的更多层数石墨烯的加入, 使扭转对 FCC 结构的破坏作用更明显, 纳米铝基复合材料在扭转时的结构稳定性降低. 但随着石墨烯层数的增加, 开始进行结构转变的角度增大, 这是石墨烯与铝基体的界面作用阻碍了位错运动来提高复合材料强韧性的现象.

图 8(e)—(g) 显示, 铝基纳米复合材料中石墨烯 90° 取向嵌入扭转时, 当达到扭转角后, FCC 结构占比显著下降, Other 结构占比显著上升, HCP 占比仍然很低. 结合图 5 分析发现, 扭转过程中, 随着基体长程有序被破坏, 部分原子结构从 FCC 结构转变为 Other 结构或是微量 HCP 结构, 石墨烯从 0° 变到 90° 嵌入, 原子结构转变推迟, 且转变数量增大. 这归因于当 90° 嵌入时, 扭转需要克服的 Gr-Al 界面从平行变为垂直作用, 复合材料除了需要克服铝基体、Gr-Al 界面相互作用, 还需要克服增强体的扭转变形作用力, 扭转需克服的机械作用力显著增大, 晶格开始转变的扭转角度增加, 扭转变形区范围增大.

在所有模型扭转过程中, 均观察到了 HCP 结构的存在, 但 90° 嵌入的复合材料中 HCP 结构在扭转变形阶段有微量变化. 通常, FCC 基质中 HCP 结构的产生是由于紧密堆积的原子平面的重排而产生的孪生和堆垛层错^[44], 这种缺陷的形成需要变形过程中能量的消耗来增大材料的稳定性^[45], Gr/Al 纳米复合材料扭转过程中体系能量消耗如图 3 和图 4 所示.

3.4 Gr/Al 纳米复合材料扭转位错与层错行为机制

位错密度是影响金属及其复合材料力学行为的关键因素之一. 在 Gr/Al 纳米复合材料中, 位错密度的变化能够揭示基体与增强体间的相互作用机制^[46]. 图 9 为 Gr/Al 纳米复合材料变形区总位错长度变化曲线, 图 10 为 Gr/Al 纳米复合材料扭转模拟中总位错最大时的形态.

图 9(a) 为 0° 嵌入模型位错总长度变化, 图 9(b) 为 90° 嵌入位错总长度变化. 从图 9 可以看出, 石墨烯的嵌入会降低扭转过程中复合材料的总位错长度, 而 90° 扭转时, 产生位错的扭转角均延迟至 147° 左右, 验证了石墨烯嵌入增强了复合材料的力学性能; 在相同体积分数下, 石墨烯层数的增加会

加剧这种抑制作用, 但当层数增至 3 层时, 复合材料的总位错长度反而有所上升. 这一现象的原因在于, 石墨烯的引入会阻碍位错传播, 其堆叠结构中增大的层间距会进一步限制位错的移动距离, 位错总长度最大值时的位错状态如图 10(a)—(f) 所示. 由此, 当石墨烯体积分数保持不变而层数增加时, 位错移动所受限制更大, 进而引发位错塞积, 导致总位错长度增大^[19]. 材料抗扭转过程中需要适量的位错抵抗变形, 但当位错过多会使区域能量增大, 局部产生残余应力, 从而影响材料的抗疲劳能力.

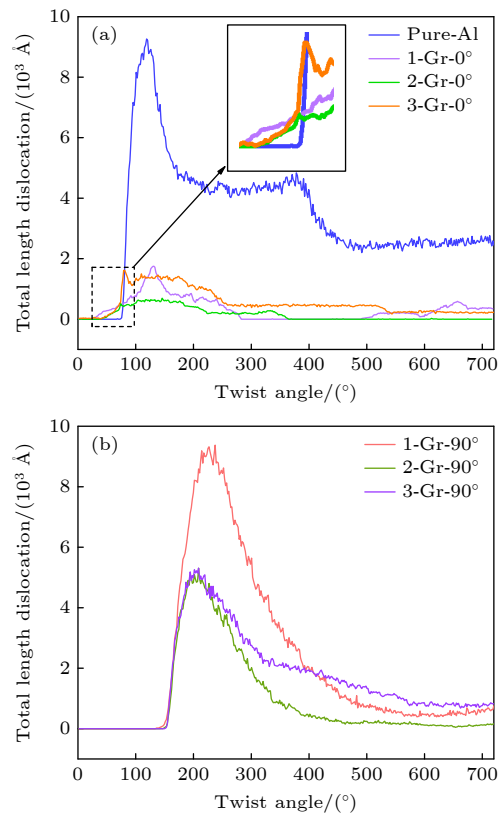


图 9 Gr/Al 纳米复合材料扭转模拟总位错长度变化 (a) Gr/Al 在 0° 扭转时位错长度; (b) Gr/Al 在 90° 扭转时位错长度
Fig. 9. Variation of total dislocation length during torsion simulations of Gr/Al composites: (a) Dislocation length under 0° torsion of Gr/Al; (b) dislocation length under 90° torsion of Gr/Al.

石墨烯既能传递铝基体声子产生的能量, 降低基体能量以稳定基体, 又能阻碍位错运动增强复合材料的力学性能. 纯铝扭转模拟中位错产生在扭转角度为 72° , 扭转时 FCC 结构占比开始下降, Other 结构占比开始上升, 且首先产生的位错为肖克莱不全位错 ($1/6\langle 112 \rangle$), 模型扭转过程中变形区初始位错出现状态如图 11 所示. 加入石墨烯后, 位错初始

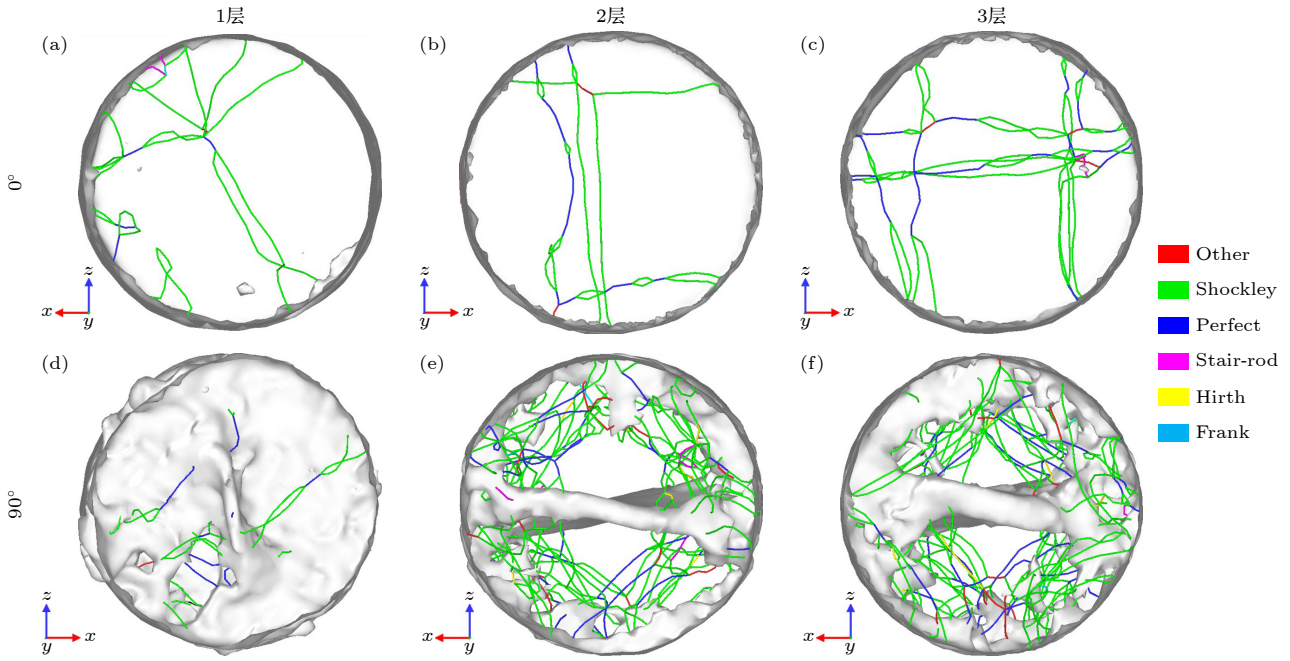


图 10 Gr/Al 纳米复合材料扭转模拟最大总位错形态 (a) 1-Gr-0°; (b) 2-Gr-0°; (c) 3-Gr-0°; (d) 1-Gr-90°; (e) 2-Gr-90°; (f) 3-Gr-90°
 Fig. 10. Maximum total dislocation morphology in torsion simulation of Gr/Al nanocomposites: (a) 1-Gr-0°; (b) 2-Gr-0°; (c) 3-Gr-0°; (d) 1-Gr-90°; (e) 2-Gr-90°; (f) 3-Gr-90°.

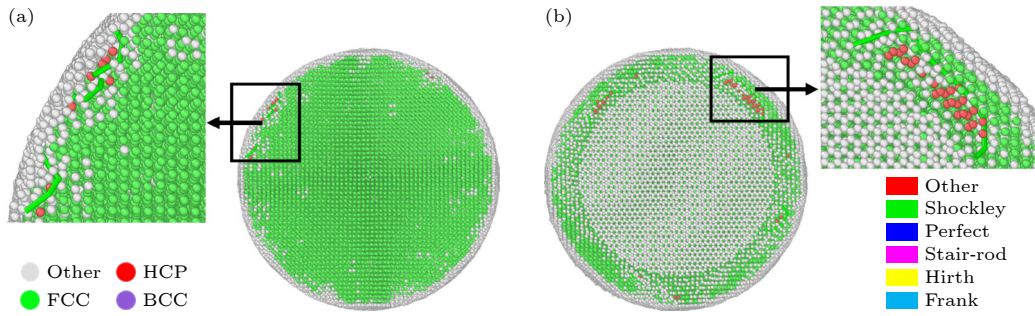


图 11 Gr/Al 纳米复合材料扭转变形区初始位错形貌 (a) Pure-Al; (b) 2-Gr-0°

Fig. 11. Initial dislocation morphologies in the deformation zone of Gr/Al nanocomposites: (a) Pure-Al; (b) 2-Gr-0°.

出现时的扭转角度均增大, 但位错首先出现在扭转变形区边界附近而不是 Gr-Al 的界面处. 这是因为石墨烯增强铝基纳米复合材料后, 界面附近的变形区受石墨烯的耦合不易变形, 但石墨烯增强范围有限, 这就使变形区边界附近产生位错. 此外, 石墨烯层数的不同显著影响位错类型的转变, 会对基体的增强效果不同.

图 12 显示纯铝及嵌入不同层数的石墨烯铝基纳米复合材料在不同嵌入方向下的 7 种模型扭转结果图, 两端 4 种颜色表示 4 个晶粒. 可以发现, 除图 12(b) 外, 石墨烯嵌入后扭转均有变形区. 图 12(b) 现象产生的原因是石墨烯横穿铝基模型, 在 Y 轴无压力的情况下扭转, Gr-Al 界面的机械互锁作用不足以支持铝基体克服石墨烯高弹性模量,

带动石墨烯产生变形, 但在扭转过程中, 石墨烯也会发生转动, 转动幅度较小. 从图 12 观察到, 相同条件下, 纯铝的扭转变形区范围较大, 石墨烯 0° 嵌入后, 随层数增加, 变形区相对增大; 90° 嵌入石墨烯后随扭转的进行, 变形区范围相对减小. 这是因为在石墨烯嵌入方向上, 平行于嵌入方向扭转与垂直于嵌入方向扭转, 需要克服石墨烯增强作用力的大小不同, 基体的变形程度就不同. 复合材料扭转过程中石墨烯的塑性变形如图 13 所示, 平行扭转时, 仅需要克服石墨烯边界与基体的机械互锁作用, 扭转后石墨烯的变形程度不显著, 0° 石墨烯嵌入变形程度可见图 13(a)–(c); 垂直扭转时, 还需要克服石墨烯本身的抗扭转强度, 相同作用下, 垂直扭转的模型抗变形能力强, 且 1–3 层内随层

数增加抗变形能力逐渐较小, 石墨烯变形程度如图 13(d)–(f) 所示.

图 9 计算了不同模型的扭转过程中总位错长度的变化. 为探究石墨烯增强铝基纳米复合材料扭转过程中位错的影响, 结合前述分析, 3-Gr-0°以肖克莱不全位错为主, 位错塞积效应适度如图 10(c), 抗扭转力学性能较好, 现选择 3 层石墨烯增强铝基纳米复合材料模型进行扭转位错探究.

图 14 为纯铝与 3 层石墨烯增强状态下, 0°

扭转与 90°扭转变形中位错总长度最大时的位错类型图. 从图 14 可以观察到, 变形过程中产生的位错类型为 $1/6 \langle 112 \rangle$ (Shockley), $1/6 \langle 110 \rangle$ (Stair-rod), $1/2 \langle 110 \rangle$ (Perfect), $1/3 \langle 100 \rangle$ (Hirth), 和其他 (Other). 显示了随嵌入角度的变化, 扭转后位错类型发生改变, 0°嵌入扭转的模型中没有出现弗兰克位错 ($1/3 \langle 111 \rangle$ (Frank)), 但仍以肖克莱不全位错 (Shockley) 为主, 90°嵌入后扭转模拟中赫特位错 ($1/3 \langle 100 \rangle$ (Hirth)) 随扭转角度增强贡献越

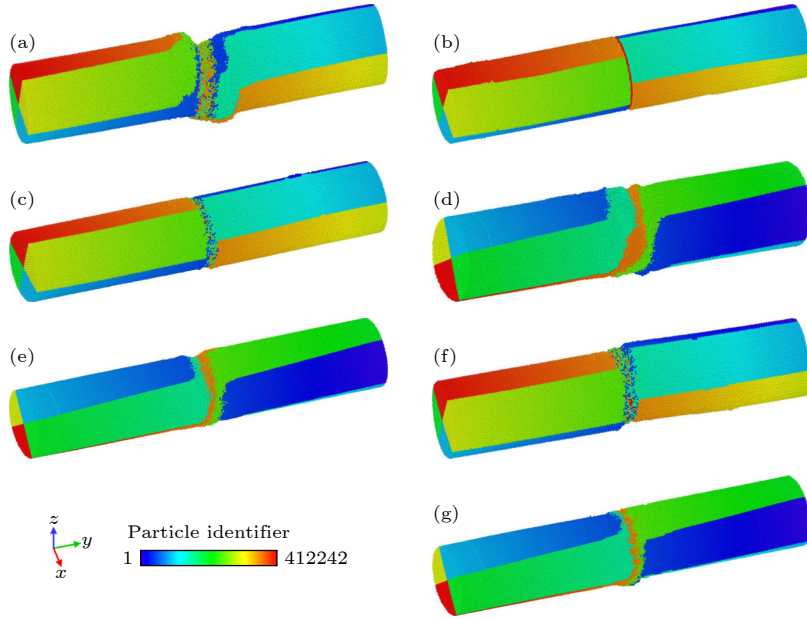


图 12 Gr/Al 纳米复合材料扭转 720°图 (a) Pure-Al; (b) 1-Gr-0°; (c) 2-Gr-0°; (d) 1-Gr-90°; (e) 2-Gr-90°; (f) 3-Gr-0°; (g) 3-Gr-90°
 Fig. 12. Renderings of Gr/Al nanocomposites after 720° torsion: (a) Pure-Al; (b) 1-Gr-0°; (c) 2-Gr-0°; (d) 1-Gr-90°; (e) 2-Gr-90°; (f) 3-Gr-0°; (g) 3-Gr-90°.

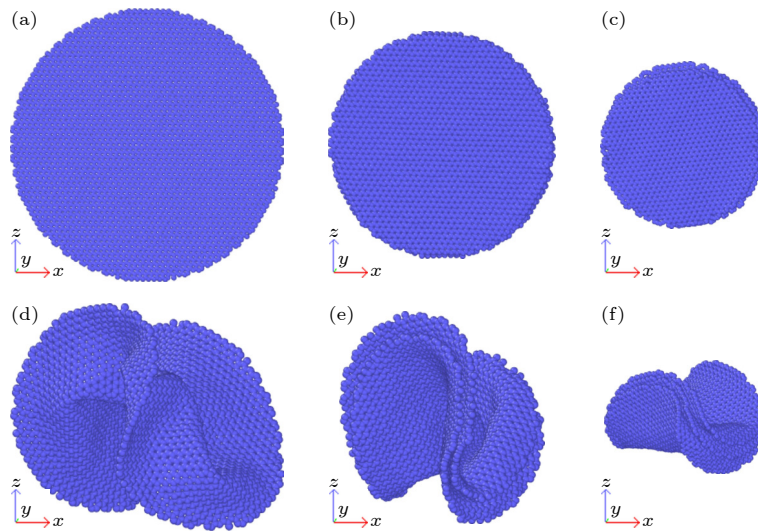


图 13 Gr/Al 纳米复合材料扭转 720°石墨烯样貌图 (a) 1-Gr-0°; (b) 2-Gr-0°; (c) 3-Gr-0°; (d) 1-Gr-90°; (e) 2-Gr-90°; (f) 3-Gr-90°
 Fig. 13. Appearance of graphene in Gr/Al nanocomposites after 720° torsion: (a) 1-Gr-0°; (b) 2-Gr-0°; (c) 3-Gr-0°; (d) 1-Gr-90°; (e) 2-Gr-90°; (f) 3-Gr-90°.

来越大. Hirth 是存在于 FCC 晶体中的一种常见的非滑移位错, 其会对位错滑移形成阻力、增大应变硬化的能力. 3 种模型均显示 $1/3 \langle 111 \rangle$ 与 $1/2 \langle 110 \rangle$ 位错之间呈现此消彼长的趋势, 但随着扭转角度的继续增大, 所有位错均减少. 这与 Fan 等^[47] 采用分子动力学研究石墨烯/铝纳米叠层复合材料的压缩性能中位错相互作用相吻合.

对 pure-Al, 3-Gr-0°, 3-Gr-90° 扭转过程进行分析发现, 在扭转过程中出现了沿着 $[111]$ 晶向排列的层片状 HCP 结构, 按照原子间的结构组成, 在 FCC 结构中产生一层 HCP 结构称为非本征层错

(ESF), 产生两层 HCP 结构称为本征层错 (ISF)^[48]. 如图 15 所示, 扭转模型中均发现了 FCC 金属中常见的 ISF, ISF 的存在会降低层错能^[49], 有助于位错分裂为 Shockly, 并阻碍了位错在滑移面上的交叉运动, 减缓蠕变速率. 可以发现随着石墨烯的嵌入, ISF 在扭转条件下生成所需要的时间更长, 在更大的扭转角度下产生. 这是由于石墨烯的强 sp^2 杂化网状结构与铝基体复合时, 碳原子与铝原子之间会生成较强的相互作用力, 产生约束性边界环境, 限制了位错的运动, 从而使 ISF 的生成过程被延缓. ISF 的生成与体系的层错能息息相关^[49], 扭

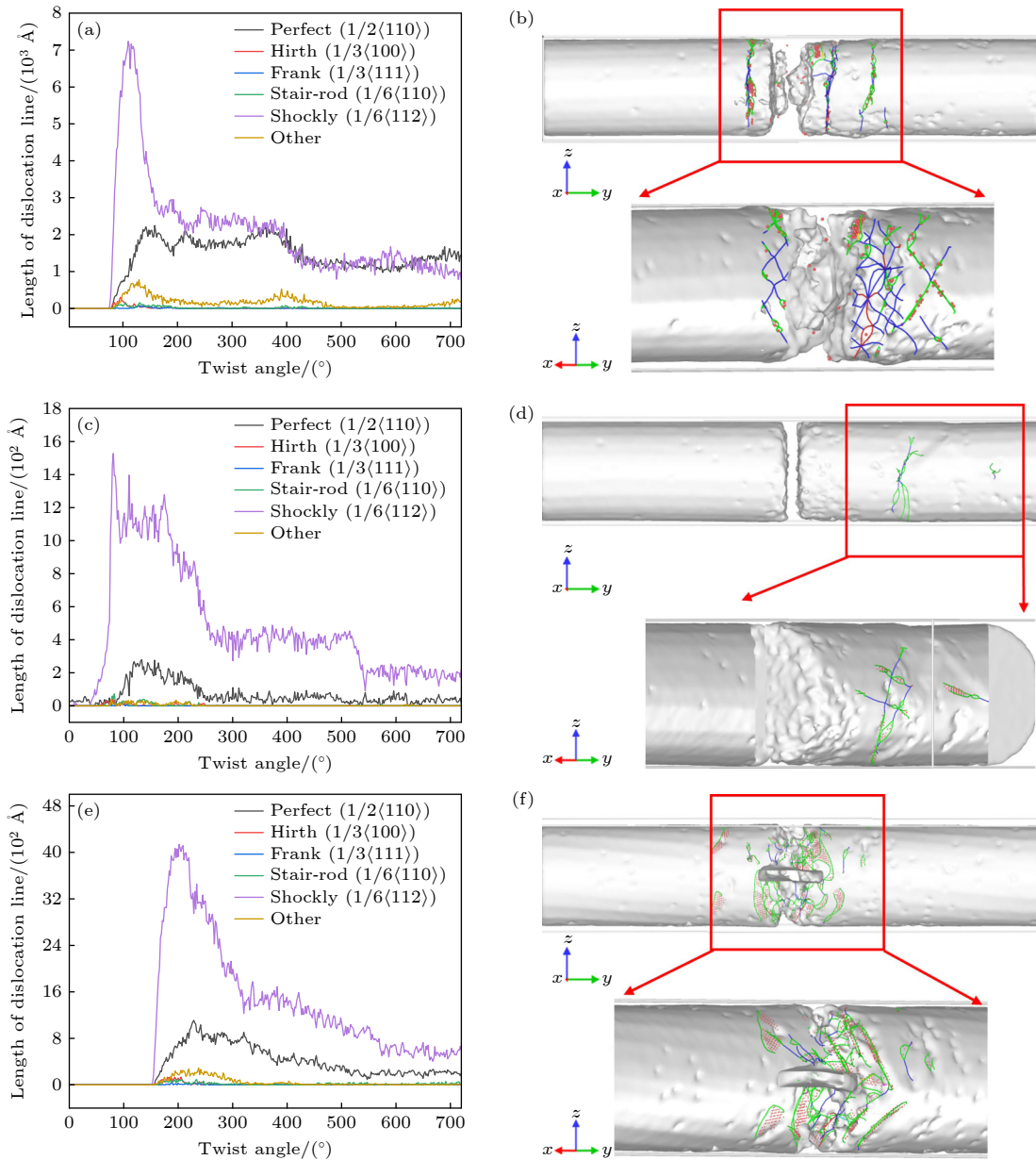


图 14 不同石墨烯嵌入角度的复合材料位错类型统计 (a), (b) Pure-Al; (c), (d) 3-Gr-0°; (e), (f) 3-Gr-90°

Fig. 14. Statistics of dislocation types in composites with different graphene embedding angles: (a), (b) Pure-Al; (c), (d) 3-Gr-0°; (e), (f) 3-Gr-90°.

转过程中体系能量消耗如图 3 和图 4 所示, 石墨烯层数的增加使体系整体能量降低, 直接提高了 ISF 生成所需要的能量壁垒, 这也就需要在更大的扭转角度引入额外多的能量, 生成 ISF 的扭转阈值被提高.

在 Gr/Al 纳米复合材料扭转过程中, 会生成多种非滑移位错, 这种局部原子排列不规则的线缺陷对材料的力学性能有显著影响. 图 16 为模型扭转部分位错图中发现的堆垛层错、 $1/6 \langle 112 \rangle$ Shockley、 $1/3 \langle 100 \rangle$ Hirth、 $1/6 \langle 110 \rangle$ Stair-rod、 $1/2 \langle 110 \rangle$ Perfect, 图 16(b), (d) 分别为图 16(a), (c) 隐去 FCC

原子的形貌图. 结合图 16(a), (b) 中位错线上的箭头指向, 可以明显观察出位错的运动方向, 成功体现了 FCC 晶体中全位错 (Perfect) 的不稳定性, 在扭动的情况下极易分解为两个肖克莱不全位错, 反应式为 $1/6 [-1\ 1\ 2] + 1/6 [-2\ -1\ 1] = 1/2 [-1\ 0\ 1]$, 如图 16(c) 所示. 扭转过程中产生大量的 Shockley 与 Stair-rod 的交互作用, 出现位错湮灭现象, 且位错主要产生在复合材料模型的表面, 终止在晶体表面. 石墨烯的嵌入可以明显地阻碍位错在复合材料中的传播, 同时也促进了位错在复合材料中的反应. 从嵌入角度而言, 90° 嵌入的石墨烯增强体促进

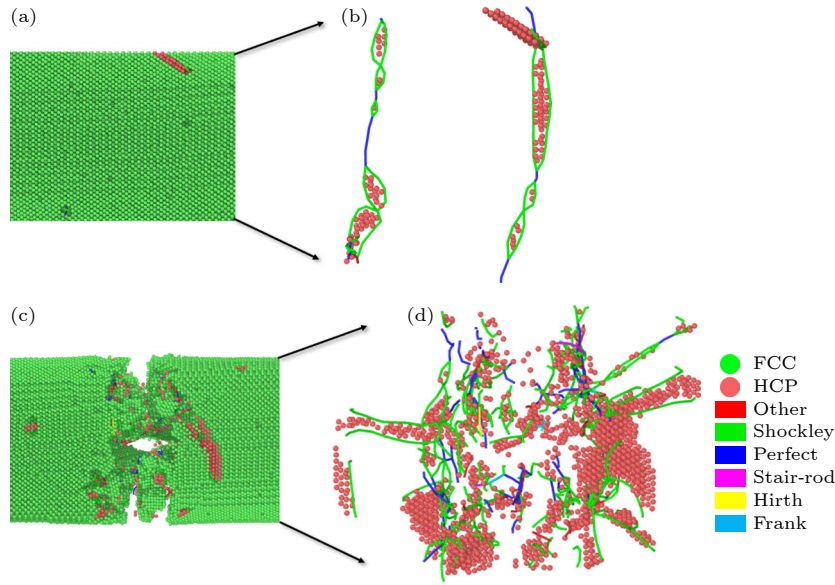


图 15 Gr/Al 纳米复合材料扭转位错-层错图 (a) 非主变形区层错宏观形貌; (b) 非主变形区部分层错与位错; (c) 主变形区层错宏观形貌; (d) 主变形区部分层错与位错

Fig. 15. Torsional dislocation-stacking fault diagram of Gr/Al nanocomposite: (a) Macroscopic morphology of stacking faults in non-primary deformation regions; (b) stacking faults and dislocations in non-primary deformation regions; (c) macroscopic morphology of stacking faults in primary deformation regions; (d) stacking faults and dislocations in primary deformation regions.

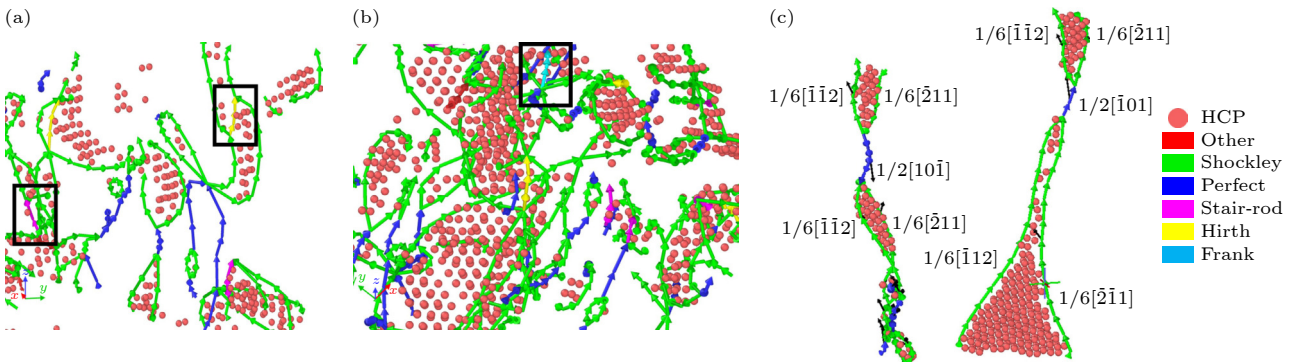


图 16 Gr/Al 纳米复合材料扭转位错的合并与湮灭 (a) Hirth 与 Stair-rod 分别与 Shockley 的交互作用; (b) 位错的合并与分解; (c) 扭转中的典型 Perfect 的分解与合并

Fig. 16. Merging and annihilation of torsion-induced dislocations in Gr/Al nanocomposites: (a) The interaction between Hirth and Shockley, as well as between Stair-rod and Shockley; (b) the merging and dissociation of dislocations; (c) decomposition and merger of the typical perfect structure in torsion.

的位错反应更加强烈, 0° 嵌入的增强体则是阻碍位错传播更为明显.

4 结 论

本文深入探究了相同体积分数下不同 Gr 层数及嵌入角度增强铝基纳米复合材料在扭转载荷作用下的微观变形行为及机制. 发现石墨烯的引入显著改变了铝基材料的扭转力学响应: 含石墨烯体系剪切应力波动更剧烈、极值更大, 且 0° 与 90° 嵌入角度下均呈现各向异性, 其中 1 层石墨烯在 430° 左右出现高应力峰值, 3 层石墨烯在 540° — 610° 附近应力波动极端值突出, 显示其可承受更大扭转载荷. 动能与势能分析表明, 石墨烯通过机械互锁、电子-声子耦合作用等限制原子运动, 降低体系势能, 且 0° 取向及层数增加时势能降低效果更显著, 3-Gr- 0° 体系稳定性最优.

同时发现, 石墨烯嵌入破坏了铝原子的近程和长程有序性, 0° 取向的破坏作用强于 90° , 且层数增加会加剧破坏作用; FCC 结构占比随扭转角度增大反而下降, 90° 取向及层数增加时结构稳定性降低更明显. 位错与层错分析发现, 石墨烯阻碍位错传播, 使初始位错出现角度增大, 扭转中位错以 Shockly 为主, 发现石墨烯 90° 取向更易引发位错反应, 0° 取向对位错传播的阻碍更显著. 石墨烯增强后复合材料内的 ISF 生成需更大扭转角度, 产生的层错能降低有助于位错分解. 3-Gr- 0° 以肖克莱不全位错为主, 位错塞积效应适度, ISF 生成阈值更高, 抗扭转性能更为优异.

综上, 石墨烯通过界面作用、位错调控及结构优化实现铝基复合材料的强化, 其堆叠层数和插入角度对扭转变形行为影响显著, 本研究为石墨烯增强金属基复合材料的原子尺度设计与性能优化提供了理论参考.

参考文献

- [1] Guo X X 2022 *M. S. Thesis* (Xian: Northwestern Polytechnical University) (in Chinese) [郭刘欣 2022 硕士学位论文 (西安: 西北工业大学)]
- [2] Song J, Zhang Q, Yao S S, Yang K M, Ma H Y, Ni J M, Zhong B A, Liu Y, Wang J, Fan T X 2024 *Acta Mater.* **263** 119414
- [3] Pradhan S K, Kabiraj S, Gupta S K, Singh A, Chavan P G, Patil S S, Pandey T N 2025 *Sci Rep-Uk.* **15** 26416
- [4] Peng Y F, Luo G H, Hu Y X, Xiong D B 2023 *Acta Mater.*

- [5] Bisht A, Srivastava M, Kumar R M, Lahiri I, Lahiri D 2017 *Mater. Sci. Eng. A* **695** 20
- [6] Tabandeh-Khorshid M, Kumar A, Omrani E, Chngsoo Kim, Pradeep R 2020 *Comp. Part. B* **183** 107664
- [7] Andrei E Y, MacDonald A H 2020 *Nat Mater.* **19** 1265
- [8] Rajendren V B, Abdullah M R, Ahmad F, Khan S U, Dar S M, Kai X Z, Zhao Y T 2025 *Compos. Interface.* **32** 713
- [9] Li M Y, Li X J, Shi H L, Xu W Q, Chi F H, Hu X S, Xu C, Fan G H, Wang X J 2025 *J. Alloy. Compd.* **1010** 177498
- [10] Yan Y P, Lei Y X, Liu S 2018 *Comp. Mater. Sci.* **151** 273
- [11] Yu J N, Wang L D, Shao B, Zong Y Y 2024 *J. Alloy. Compd.* **988** 174142
- [12] Chen B, Kondoh K, Umeda J, Li S, Jia L, Li J 2019 *J. Alloy. Compd.* **789** 25
- [13] Zhao Z Y, Bai P K, Du W B, Liu B, Pan D, Das R, Liu C T, Guo Z H 2020 *Carbon* **170** 302
- [14] Naseer A, Ahmad F, Aslam M, Guan B H, Harun W S W, Muhamad N, Raza M R, German R M 2019 *Mater. Manuf. Process.* **34** 957
- [15] Stankovich S, Dikin D A, Dommett G H B, Kohlhaas K M, Zimney E J, Stach E A, Piner R D, Nguyen S T, Ruoff R S 2006 *Nature* **442** 282
- [16] Qiu C H, Su Y S, Yang J Y, Wang X S, Chen B Y, Ouyang Q B, Zhang D 2021 *Compos. Part B-Eng.* **220** 108996
- [17] Ming Z F, Song H Y, An M R 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 086201 (in Chinese) [明知非, 宋海洋, 安敏荣 2022 物理学报 **71** 086201]
- [18] Ou B X, Yan J X, Wang Q S, Lu L X 2022 *Molecules* **27** 905
- [19] Li J W, Guo J G, Zhou L J 2023 *Physics E* **47** 115597
- [20] Geng Y F, Zhang X H, Zheng Y F, Zhao L, Li Z, Xu Li, Qi R J, Wang Z P, Sha G, Zhang D, Xiong D B 2025 *Nat. Commun.* **16** 6804
- [21] Das D K, Kumar B 2025 *Diam. Relat. Mater.* **152** 111981
- [22] Guo Y M, Yi D Q, Liu H Q, Wang B, Bo J 2020 *J. Mater. Sci.* **55** 3314
- [23] Azziz Z, Rahmani K, Taheri-Behrooz F 2022 *Metals-Basel.* **12** 1883
- [24] Wang X, Xiao W, Wang L G, Shi J M, Sun L, Cui J D, Wang J W 2020 *Physics E* **123** 114172
- [25] Zhu J Q, Liu X, Yang Q S 2019 *Comp. Mater. Sci.* **160** 72
- [26] Peng W X, Sun K 2020 *Mech. Mater.* **141** 103270
- [27] Plimpton S 1995 *J Comput Phys.* **117** 1
- [28] Polyakova P V, Nazarov K S, Khisamov R K, Baimova J A 2020 *J. Phys. Conf.* **1435** 12065
- [29] Thompson A P, Aktulga H M, Berger R, Bolintineanu D S, Brown W M, Crozier P S, in 't Veld P J, Kohlmeyer A, Moore S G, Nguyen T D, Shan R, Stevens M J, Tranchida J, Trott C, Plimpton S J 2022 *Comput. Phys. Commun.* **271** 108171
- [30] Wang P, Yang X H, Tian X B 2015 *J. Mater. Res.* **30** 709
- [31] Hoover W G 1986 *Phys Rev A.* **34** 2499
- [32] Daw M S, Foiles S M, Baskes M I 1993 *Mater. Sci. Rep.* **9** 251
- [33] Mendelev M I, Kramer M J, Becker C A, Asta M 2008 *Philos. Mag.* **88** 1723
- [34] Stuart S J, Tutein A B, Harrison J A 2000 *J Chem Phys.* **112** 6472
- [35] Johnson J K, Zollweg J A, Gubbins K E 1993 *Mol. Phys.* **78** 591
- [36] Fan P F, Goel S, Luo X C, Yan Y D, Geng Y Q, He Y 2021 *Appl. Surf. Sci.* **552** 149489
- [37] Stukowski A 2009 *Model. Simul. Mater. Sc.* **18** 015012

- [38] Jian W R, Xie Z C, Xu S Z, Su Y Q, Yao X H, Beyerlein I J 2020 *Acta Mater.* **199** 352
- [39] Stukowski A, Bulatov V V, Arsenlis A 2012 *Model. Simul. Mater. Sc.* **20** 085007
- [40] Jin K, Wang H, Tao J, Zhang X 2019 *Compos. B Eng.* **171** 254
- [41] Cheng C, Duan M Y, Wang Z, Zhou X L 2020 *Philos. Mag.* **100** 2275
- [42] Xing C S, Sheng J, Wang L D, Fei W D 2021 *Oxf. Open. Mater. Sci.* **1** itab008
- [43] Yu X X, Li D S, Ye Y, Lang W C, Liu J H, Chen J S, Yu S S 2024 *Acta Phys. Sin.* **73** 238701 (in Chinese) [余欣秀, 李多生, 叶寅, 郎文昌, 刘俊红, 陈劲松, 于爽爽 2024 物理学报 **73** 238701]
- [44] Tang J, Ahmadi A, Alizadeh A, Abedinzadeh R, Abed A M, Smaism G F, Hadrawi S K, Nasajpour-Esfahani N, Toghraie D 2023 *J. Mater. Res. Technol.* **24** 1390
- [45] Wang W Y, Tang B, Shang S L, Wang J W, Li S L, Wang Y, Zhu J, Wei S Y, Wang J, Darling K A, Mathaudhu S N, Wang Y G, Ren Y, Hui X D, Kecskes L J, Li J S, Liu Z K 2019 *Acta Mater.* **170** 231
- [46] Zhu S Q, Ringer S P 2018 *Acta Mater.* **144** 365
- [47] Fan S M, Yu Q, Peng M J, Bu H Y, Zhou X L, Li J, Duan Y H, Li M N 2025 *J. Mater. Res. Technol.* **36** 5018
- [48] Sun R X 2024 *M. S. Thesis* (Harbin: Harbin Engineering University) (in Chinese) [孙睿雪 2024 硕士学位论文 (哈尔滨: 哈尔滨工程大学)]
- [49] Chen S Y, Wang Q, Liu X M, Tao J M, Wang M L, Wang H W 2020 *Mater. Today. Commun.* **24** 101085

Micro-deformation behavior of graphene-reinforced aluminum-based nanocomposites under torsional loading*

LI Rufeng¹⁾ LI Duosheng^{1)2)†} YE Yin¹⁾ YU Xinxiu¹⁾ DAO Yangyang¹⁾
JIANG Wugui¹⁾ QIN Qinghua³⁾

1) (*School of Materials Science and Engineering, Nanchang Hangkong University, Nanchang 330063, China*)

2) (*Institute of Advanced Lightweight Aviation Materials, Nanchang 330063, China*)

3) (*School of Institute of Frontier Interdisciplinary Technology, Shenzhen MSU-BIT University, Shenzhen 518172, China*)

(Received 10 October 2025; revised manuscript received 12 December 2025)

Abstract

In this study, seven models of pure aluminum and graphene-reinforced aluminum-based composite nanomaterials (Gr/Al nanocomposites) are constructed using molecular dynamics simulations in which 0.5% of 1–3 layers of graphene are embedded at 0° and 90° orientations. This study aims to investigate the microscopic deformation behavior of Gr/Al nanocomposites under torsional loading. The simulation results indicate that the graphene significantly influences the torsional mechanical response of aluminum matrix: graphene reduces the potential energy of the system and smoothens kinetic energy fluctuations through mechanical interlocking and electron-phonon coupling. The composites containing graphene exhibit stronger shear stress fluctuations with higher extreme values. The influence becomes more pronounced as the number of layers increase, when the graphene is embedded at 0°. Specifically, 3-layer graphene embedded at 0° (3-Gr-0°) shows prominent stress extremes near 540°–610°, indicating that 3-Gr-0° can withstand greater torsional loads.

Further research reveals that graphene embedding disrupts both the short-range and long-range orderliness of aluminum atoms. The 0° orientation exerts a stronger disruptive effect than the 90° orientation, and an increase in the number of layers exacerbates this effect. The proportion of face-centered cubic (FCC) structures decreases as torsional angle increases. A more pronounced reduction in structural stability is observed at 90° orientation and with an increase in the number of layers. The analysis of dislocations and stacking faults indicates that graphene hinders dislocation propagation, increasing the angle at which initial dislocations appear. During torsion, Shockley partial dislocations dominate. The 90° orientation of graphene is more susceptible to triggering dislocation reactions, while the 0° orientation more significantly obstructs dislocation propagation. After graphene reinforcement, the generation of intrinsic stacking faults within the composites requires a larger torsional angle, and the reduction in stacking fault energy facilitates dislocation decomposition. The 3-Gr-0° configuration predominantly features Shockley partial dislocations, with a moderate dislocation pile-up effect and a higher threshold for ISF generation. This study provides a theoretical reference for the structural design and performance optimization of such composites.

Keywords: graphene, aluminum-based nanocomposite, molecular dynamics, torsional simulation

DOI: [10.7498/aps.75.20251374](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251374)

CSTR: [32037.14.aps.75.20251374](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20251374)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51562027, 12062016), the Key Research and Development Program Key Projects of Jiangxi Province, China (Grant No. 20201BBE51001), the Key Research and Development Program of Jiangsu Province (Industrial Prospects and Key Core Technologies), China (Grant No. BE2021055), and the High-Performance Computing Services provided by the Modern Information Center of Nanchang Hangkong University, China.

† Corresponding author. E-mail: duosheng.li@nchu.edu.cn

石墨烯增强铝基纳米复合材料扭转载荷下的微观变形行为

李如峰 李多生 叶寅 余欣秀 岛洋洋 江五贵 秦庆华

Micro-deformation behavior of graphene-reinforced aluminum-based nanocomposites under torsional loading

LI Rufeng LI Duosheng YE Yin YU Xinxiu DAO Yangyang JIANG Wugui QIN Qinghua

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 060811 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251374

CSTR: 32037.14.aps.75.20251374

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251374>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于分子动力学模拟的石墨烯镁基复合材料力学行为

Mechanical behavior of graphene magnesium matrix composites based on molecular dynamics simulation

物理学报. 2022, 71(8): 086201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211753>

石墨烯尺寸和分布对石墨烯/铝基复合材料裂纹扩展的影响

Effects of graphene size and arrangement on crack propagation of graphene/aluminum composites

物理学报. 2022, 71(13): 134702 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212203>

WC-Co硬质合金表面石墨烯沉积生长分子动力学仿真研究

Molecular dynamics simulation of graphene deposition and growth on WC-Co cemented carbides

物理学报. 2023, 72(6): 068703 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221332>

硬质合金表面镍过渡层对碳原子沉积与石墨烯生长影响的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of effect of nickel transition layer on deposition of carbon atoms and graphene growth on cemented carbide surfaces

物理学报. 2024, 73(23): 238701 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20241170>

基于机器学习的菱形穿孔石墨烯负泊松比效应预测与优化

Prediction and optimization of negative Poisson's ratio in rhombic perforated graphene based on machine learning

物理学报. 2025, 74(9): 096201 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241624>

金刚石晶界辅助石墨烯沉积的成核机理仿真

Simulation research on nucleation mechanism of graphene deposition assisted by diamond grain boundary

物理学报. 2022, 71(8): 086103 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211981>