

## 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

魏宁 赵思涵 李志辉 区炳显 花安平 赵军华

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

Wei Ning Zhao Si-Han Li Zhi-Hui Ou Bing-Xian Hua An-Ping Zhao Jun-Hua

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 134702 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20212203

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212203>

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/铝基复合材料在纳米压痕过程中位错与石墨烯相互作用机制的模拟研究

Simulation of interaction behavior between dislocation and graphene during nanoindentation of graphene/aluminum matrix nanocomposites

物理学报. 2021, 70(6): 066201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201591>

#### 原位生长技术制备石墨烯强化铜基复合材料

Graphene enforced copper matrix composites fabricated by *in-situ* deposition technique

物理学报. 2021, 70(8): 086201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201943>

#### 石墨烯表面的特征水分子排布及其湿润透明特性的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of characteristic water molecular arrangement on graphene surface and wetting transparency of graphene

物理学报. 2019, 68(8): 086801 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20182307>

#### 纳米微结构表面与石墨烯薄膜的界面黏附特性研究

Interface adhesion property between graphene film and surface of nanometric microstructure

物理学报. 2018, 67(3): 030201 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172153>

#### 液态镓在石墨烯表面的润湿性及形貌特征

Wettability and morphology of liquid gallium on graphene surface

物理学报. 2018, 67(14): 149601 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172717>

# 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\*

魏宁<sup>1)</sup> 赵思涵<sup>1)</sup> 李志辉<sup>2)3)†</sup> 区炳显<sup>4)</sup> 花安平<sup>1)</sup> 赵军华<sup>1)‡</sup>

1) (江南大学江苏省食品先进制造装备与技术重点实验室, 无锡 214122)

2) (中国空气动力研究与发展中心, 绵阳 621000)

3) (计算流体力学国家实验室, 北京 100191)

4) (江苏省特种设备安全监督检验研究院, 国家石墨烯产品质量检验检测中心(江苏) 214174)

(2021 年 11 月 30 日收到; 2022 年 3 月 7 日收到修改稿)

铝基复合材料由于其质轻高强的特点, 是机械工业和航空航天工程中最重要材料之一. 而石墨烯因其优异力学性能和高比表面积等特点, 被作为金属基复合材料的理想增强相. 然而, 目前石墨烯在铝基复合材料中对裂纹扩展影响的机制尚不清晰, 制约了其在铝基复合材料的设计和应用. 本文采用分子动力学模拟方法研究了石墨烯的尺寸和分布对铝基复合材料中裂纹扩展的影响. 研究表明, 当石墨烯尺寸  $l \leq 3.35$  nm 时, 在拉伸过程中产生的亚裂纹促进了裂纹扩展. 值得注意的是, 这种促进作用随着石墨烯与裂纹的距离增大而减弱. 当石墨烯尺寸  $l > 3.35$  nm 时, 石墨烯阻碍了裂纹的扩展和亚裂纹位错的滑移. 此外, 石墨烯的分布和角度可以有效地改变裂纹扩展路径. 本研究的结果有助于理解石墨烯在其铝基复合材料中的破坏失效的作用, 为设计高性能石墨烯/铝基复合材料提供一定参考依据.

**关键词:** 石墨烯, 铝基复合材料, 裂纹扩展, 分子动力学模拟

**PACS:** 47.11.Mn, 62.25.-g, 81.70.Bt

**DOI:** 10.7498/aps.71.20212203

## 1 引言

铝基复合材料由于其密度低、耐腐蚀性能好、易于成型加工等优点, 在航空航天、汽车、船舶等工业领域得到了广泛的应用<sup>[1-3]</sup>. 近年来, 随着纳米技术的迅速发展, 纳米材料由于其优异性能而成为备受青睐的填充剂<sup>[4]</sup>. 而石墨烯是一种具有优异力学性能的层状材料, 拉伸强度达到惊人的 130 GPa, 而杨氏模量也达到了 1 TPa<sup>[5-8]</sup>. 此外, 其高比表面积的显著特点<sup>[9]</sup>, 提高了与基体的接触

面积, 增强了界面效应, 是各种复合材料中理想的纳米填充剂<sup>[10-12]</sup>. 为了提升石墨烯/铝基复合材料力学性能, 大量研究集中在原子尺度上的结构设计. 其中, 天然珍珠层结构出色的强度和韧性受到研究人员的关注<sup>[13,14]</sup>, 研究人员通过仿生设计, 模拟珍珠层材料的特性, 制备了氧化石墨烯/铝基纳米层状复合材料, 其伸长率高于纯铝<sup>[15]</sup>. Kim 等<sup>[16]</sup>通过在金属基体中加入石墨烯, 使复合材料获得了更好的力学性能, 发现石墨烯可以有效地阻碍位错生长, 从而使石墨烯/铜和石墨烯/镍复合材料分别获得 1.5 GPa 和 4.0 GPa 的超高强度. 相关研究

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11502217) 和载人航天工程技术课题“大型航天器飞行与再入监视预报系统研制” (批准号: 2020-ZKZX-5011) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zhli0097@x263.net

‡ 通信作者. E-mail: junhua.zhao@163.com

表明, 石墨烯/铝基复合材料中层状结构的层厚和晶粒尺寸对其失效行为也有重要影响<sup>[17,18]</sup>, 当其层厚小于面内晶粒尺寸时, 位错主要与石墨烯界面相互作用, 同时石墨烯较强的存储位错能力提高了材料的应力硬化性能. 因此, 石墨烯的阻碍和存储位错的能力, 是使得石墨烯/铝基复合材料力学性质提升的重要因素.

石墨烯/铝基复合材料在制造、加工或辐照过程中不可避免地生成微裂纹, 这会极大地影响其力学性能并导致材料断裂<sup>[19]</sup>. 大量实验和理论研究关注于石墨烯/铝基复合材料的塑性变形过程中缺陷生长和力学行为<sup>[20–22]</sup>. 研究人员发现, 石墨烯在金属基体中可以更均匀地分布应力, 并且在早期阶段阻止裂纹扩展<sup>[11,19]</sup>. 因此, 研究石墨烯尺寸和分布对石墨烯/铝基复合材料裂纹扩展行为的影响, 对该材料的结构设计具有重要意义. 本文采用分子动力学 (molecular dynamics, MD) 模拟方法研究了石墨烯/铝基 (graphene/aluminum, Gr/Al) 复合材料在拉伸过程中裂纹扩展行为. 通过对石墨烯、裂纹和位错之间相互作用机制分析, 揭示了石墨烯尺寸和分布对带有中心裂纹的石墨烯/铝基材料裂纹扩展的影响, 从而为设计高可靠性的石墨烯/铝基复合材料提供了一定的理论依据.

## 2 计算方法与模型

### 2.1 石墨烯/铝基复合材料模型

采用 LAMMPS<sup>[23]</sup> 进行分子动力学模拟. 如图 1 所示, 原子模型由带有裂纹的单晶铝基体和两片单层石墨烯组成. 模型尺寸为  $20.25\text{ nm} \times 20.25\text{ nm} \times 2.43\text{ nm}$  ( $L \times W \times H$ ), 金属基体沿  $x$ ,  $y$ ,  $z$  方向分别为  $[100]$ ,  $[010]$  和  $[001]$ <sup>[24]</sup> 晶向. 所有模型的初始中心裂纹长度  $a = 2.83\text{ nm}$ , 宽度  $b = 0.81\text{ nm}$ . 石墨烯薄片的锯齿构型 (armchair) 和扶

手构型 (zigzag) 边缘分别与铝基的  $[010]$  和  $[001]$  晶向对齐. 在所有的模拟中, 将石墨烯沉积在铝基体的  $(100)$  面上, Zhang 等<sup>[25]</sup> 也采用这个晶面进行研究. 石墨烯在  $y$  方向长度  $l$  的范围设置在  $0\text{--}20.25\text{ nm}$  之间. 当  $l = 0\text{ nm}$  时, 模型为纯铝. 当石墨烯长度为  $20.25\text{ nm}$  时 (与铝基体长度  $W$  相同), 这时石墨烯在  $y$  方向也为周期性边界条件, 这个模型简记为 p-Gr/Al. 在研究石墨烯的长度对材料裂纹扩展的影响时, 石墨烯与裂纹的相对距离  $\delta$  为  $1.72\text{ nm}$ . 研究石墨烯分布位置对裂纹扩展的影响时,  $\delta$  的范围设置在  $1.72\text{--}4.96\text{ nm}$  之间. 表 1 为不同模型石墨烯长度和分布位置参数. 删除铝原子后的空隙长度减去石墨烯两端与铝原子间的平衡距离 ( $0.30135 \times 2\text{ nm}$ ) 就是可以容纳的石墨烯长度, 根据这个长度选择合适的石墨烯与之匹配以获得不同长度的石墨烯/铝基符合材料模型. 其中 A-Gr/Al 型与 B-Gr/Al 型的分类依据在 3.2 中进行说明.

研究石墨烯分布角度对裂纹扩展的影响时, 石墨烯与裂纹的相对角度  $\theta$  为  $0^\circ$ ,  $45^\circ$  和  $90^\circ$  的模型如图 2 所示. 裂纹尺寸与基体尺寸与图 1 中的保持

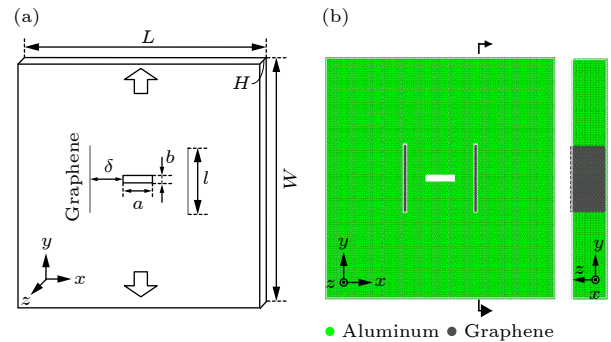


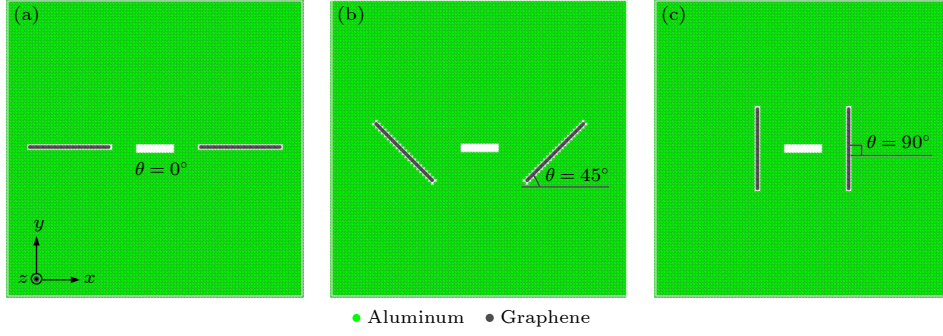
图 1 (a) Gr/Al 复合材料的模型示意图; (b) 原子结构模型 (左侧为正视图, 右侧为剖视图)

Fig. 1. (a) Geometrical representation of the simulated Gr/Al composite; (b) atomistic configurations for modeling (front view on the left and section view on the right).

表 1 不同模型的参数, 包括石墨烯长度 ( $l$ ) 和石墨烯与裂纹的相对距离 ( $\delta$ )

Table 1. Parameters of different models including graphene length ( $l$ ) and the distance between graphene and crack ( $\delta$ ).

| 模型名称      | $l/\text{nm}$ | $\delta/\text{nm}$ | 模型名称      | $l/\text{nm}$ | $\delta/\text{nm}$ |
|-----------|---------------|--------------------|-----------|---------------|--------------------|
| Pure Al   | 0             | 0                  | B-Gr/Al-2 | 5.43          | 1.72               |
| A-Gr/Al-1 | 0.97          | 1.72               | B-Gr/Al-3 | 7.53          | 1.72               |
| A-Gr/Al-2 | 1.49          | 1.72—4.96          | B-Gr/Al-4 | 9.92          | 1.72               |
| A-Gr/Al-3 | 2.64          | 1.72               | B-Gr/Al-5 | 15.22         | 1.72               |
| A-Gr/Al-4 | 3.35          | 1.72               | p-Gr/Al   | 20.25         | 1.72               |
| B-Gr/Al-1 | 4.18          | 1.72—4.96          |           |               |                    |

图 2 石墨烯分布角度分别为 (a)  $\theta = 0^\circ$ , (b)  $\theta = 45^\circ$  和 (c)  $\theta = 90^\circ$  的 Gr/Al 复合材料模型Fig. 2. Model of the Gr/Al composites with graphene orientations of (a)  $\theta = 0^\circ$ , (b)  $\theta = 45^\circ$  and (c)  $\theta = 90^\circ$ .

一致, 石墨烯离裂纹最近端与裂纹的相对距离仍为 1.72 nm. 分别从 A 类和 B 类 Gr/Al 复合材料中选择石墨烯尺寸为 1.49 nm 和 5.43 nm 的模型研究石墨烯分布角度对裂纹扩展的影响.

## 2.2 势函数和计算方法

本文中 Al-Al 原子间的相互作用采用 EAM<sup>[26]</sup> 势函数, C-C (carbon, C) 原子间的相互作用采用 AIREBO<sup>[27]</sup> 势函数描述. 用 LJ 势函数描述 C-Al 的相互作用<sup>[28]</sup>, 其中 Al-Al 之间的 EAM 势函数为

$$E_{\text{Al-Al}} = \sum_i \varepsilon \left[ \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} V(r_{ij}) + c \sqrt{\rho_i} \right], \quad (1)$$

$$V(r_{ij}) = \left( \frac{a}{r_{ij}} \right)^n, \quad \rho_i = \sum_{j \neq i} \left( \frac{a}{r_{ij}} \right)^m, \quad (2)$$

式中,  $\varepsilon$  和  $a$  分别为势阱深度和零势距离;  $n$ ,  $m$  和  $c$  是关于铝原子的常数;  $r_{ij}$  为第  $i$  个和第  $j$  个铝原子之间的距离;  $V(r_{ij})$  为第  $i$  和第  $j$  个铝原子间的对势;  $\rho_i$  为第  $i$  个铝原子的局域电子密度. 对于 AIREBO 势函数而言, 势能由三部分组成:

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \left[ E_{ij}^{\text{REBO}} + E_{ij}^{\text{LJ}} + \sum_{k \neq i} \sum_{l \neq i, j, k} E_{kijl}^{\text{TORSION}} \right], \quad (3)$$

其中  $E_{ij}^{\text{REBO}}$  势函数通常用来描述石墨烯和碳纳米管之间的相互作用;  $E_{ij}^{\text{LJ}}$  与添加长程力的标准 LJ 交互作用势函数的形式类似;  $E_{kijl}^{\text{TORSION}}$  是一个四体势函数, 它描述构型中不同的二面角扭转作用. Al-C 原子间的相互作用模型采用 LJ 势. 模型函数如下:

$$E_{\text{LJ}} = 4\varepsilon_{\text{Al-C}} \left[ \left( \frac{\sigma_{\text{Al-C}}}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{\text{Al-C}}}{r} \right)^6 \right], \quad (4)$$

$$\sigma_{\text{Al-C}} = \frac{\sigma_{\text{C-C}} + \sigma_{\text{Al-Al}}}{2}, \quad \varepsilon_{\text{Al-C}} = \sqrt{\varepsilon_{\text{C-C}} \times \varepsilon_{\text{Al-Al}}}, \quad (5)$$

其中原子间的势阱深度和零势距离参数由表 2 所示. 对于 Al-C 原子间的相互作用,  $\varepsilon_{\text{Al-C}}$ ,  $\sigma_{\text{Al-C}}$  基于 (5) 式获得. 本文  $\varepsilon_{\text{Al-C}}$  和  $\sigma_{\text{Al-C}}$  的值分别为 0.0351 eV 和 3.0135 Å<sup>[29,30]</sup>.

表 2 原子间 Lennard-Jones (L-J) 势函数参数值

Table 2. Lennard-Jones (L-J) potential parameter for atomic interactions.

| L-J 势函数参数               | 相互作用的原子               |                     |                         |
|-------------------------|-----------------------|---------------------|-------------------------|
|                         | Al-Al <sup>[31]</sup> | C-C <sup>[32]</sup> | Al-C <sup>[29,30]</sup> |
| $\sigma/\text{\AA}$     | 2.6200                | 3.4070              | 3.0135                  |
| $\varepsilon/\text{eV}$ | 0.4157                | 0.00296             | 0.0351                  |

模型在等温-等压系综下保持温度在 300 K, 压强为 0 Pa, 弛豫 100 ps 以达到平衡状态. 接着沿  $y$  方向以应变率为  $0.0005 \text{ ps}^{-1}$  拉伸盒子, 使应变达到 20%, 以更好衡量裂纹扩展效果. 在此期间时间步长设置为 1 fs, 模型三个方向都为周期性边界条件.

模拟结果采用 OVITO<sup>[33]</sup> 软件进行可视化分析. 中心对称参数 (the centrosymmetry parameter, CSP)<sup>[34]</sup> 是为了衡量原子失配度, 以识别在拉伸过程是否产生缺陷. CSP 值越大, 晶体结构越不完整. 采用共近邻分析法 (common neighbor analysis, 简记为 CNA)<sup>[35]</sup> 分析原子结构. 此外, 利用位错提取法 (dislocation extraction algorithm, 简记为 DXA)<sup>[36]</sup> 分析拉伸过程中产生的局部位错类型.



### 3 结果与讨论

#### 3.1 纯铝和 p-Gr/Al 复合材料的裂纹扩展行为

为了研究在拉伸过程中, 石墨烯对 p-Gr/Al 复合材料的裂纹扩展的影响, 图 3 和图 4 给出了含裂纹的纯铝和 p-Gr/Al 在单轴拉伸载荷下裂纹长度-应变曲线以及微观结构变化. 从图 3(a) 纯铝的裂纹长度与应变关系曲线可以看到, 裂纹扩展经历了三个阶段, 其弹性变形和塑性变形相继发生. 第 I 阶段为弹性阶段且裂纹长度基本保持不变. 第 II 阶段, 材料变形进入塑性阶段, 裂纹长度急剧增长后进入缓慢增长的第 III 阶段. 图 3(a) 中不同阶

段的 A-C 特征点的 CSP 原子结构图如图 3(b)–(d) 所示. 从图 3(b) 中可以看到, 模型原子晶格较为完整, 在弹性阶段内未产生任何位错. 第 II 阶段由 A 点到 B 点, 裂纹长度由 2.74 nm 快速增长到 7.23 nm. 从图 3(c) 中看到, B 点铝基体裂纹尖端附近大量原子的 CSP 值较高, 存在缺陷, 对这种缺陷采用 CNA 进行结构分析, (如插图所示) 可以看到缺陷主要由层错 (stacking fault, SF) 和无序结构组成并主导第 II 阶段塑性变形. 在第 III 阶段, 裂纹尖端受到无序结构阻碍使裂纹增长缓慢, 图 3(d) 中裂纹附近的缺陷不再局限在裂纹尖端附近而是分布在铝基体内部.

对于 p-Gr/Al 复合材料, 图 4(a) 中根据裂纹曲线变化明显地分为了四个阶段. p-Gr/Al 与纯铝

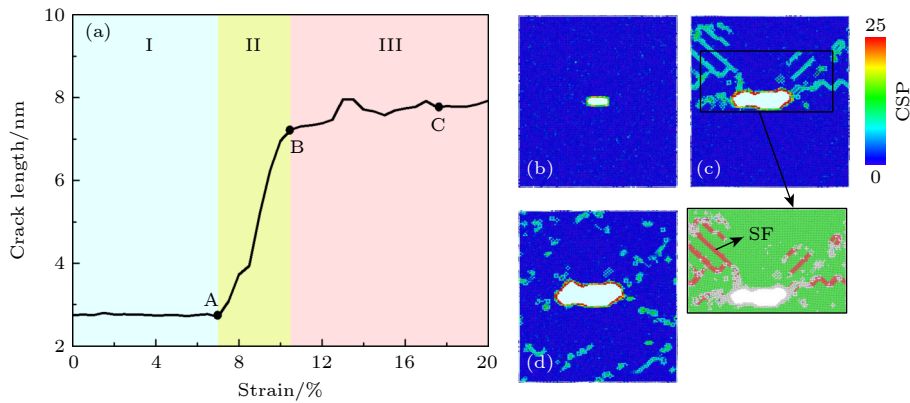


图 3 (a) 纯铝在单轴拉伸过程中的裂纹长度-应变曲线; (b)–(d) 为图 3(a) 中的 A-C 点 CSP 原子结构图 (插图中绿色原子为面心立方结构 (FCC), 红色原子为密排六方结构 (HCP), 白色原子为其他结构)

Fig. 3. Uniaxial tensile process of pure Al: (a) Crack length-strain curve; (b)–(d) CSP morphology at points A–C corresponding to Fig. 3(a). (Atoms in the inset are colored by the CNA. Green atoms represent face-centered cubic structure (FCC), red atoms represent hexagonal closest packed structure (HCP) and white ones have OTHER structures.).

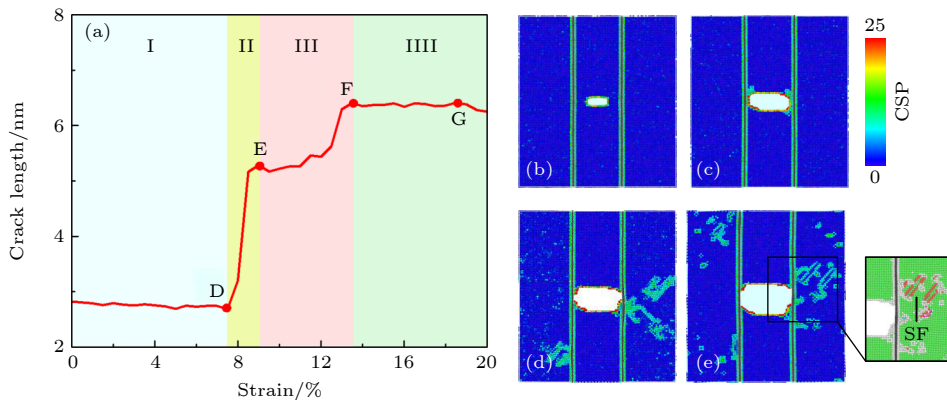


图 4 (a) p-Gr/Al 的单轴拉伸过程裂纹长度-应变曲线; (b)–(e) 为图 4(a) 中的 D-G 点 CSP 原子结构图 (插图中绿色为 FCC 结构, 红色为 HCP 结构, 白色为 OTHER 结构, 黑色为 C 原子)

Fig. 4. (a) Crack length-strain curve of p-Gr/Al under uniaxial tensile; (b)–(e) CSP morphology of p-Gr/Al corresponding to point D–G in Fig. 4(b). (Atoms in the inset are colored by the CNA. Green atoms have an FCC structure, red atoms have an HCP structure, white ones have other structures and black atoms are C atoms.).

的裂纹扩展曲线在第 I 阶段裂纹长度都保持不变然后在第 II 阶段急速增长. p-Gr/Al 的裂纹长度曲线在第 III 阶段缓慢增长后在第 IV 阶段裂纹长度围绕一定范围波动. 为更直观的观察裂纹扩展过程原子结构变化, 对图 4(a) 曲线上 D—G 特征点进行 CSP 结构分析如图 4(b)—(e). D 点对应的 CSP 原子结构可以看出, 大部分铝基体晶格结构保持完整, 只有部分点缺陷. 此外, 石墨烯-铝基界面产生失配度较大, 这是因为铝原子与碳原子排列形式不同而产生界面晶格失配. 在第 II 阶段裂纹快速扩展到 E 点 (裂纹长度为 5.28 nm), 从图 4(c) 可以看出, 这一阶段裂纹与石墨烯相互作用, 并且在接触部位产生无序结构原子阻碍裂纹扩展. 在第 III 阶段, 裂纹扩展速度变缓, 裂纹不断突破无序结构的阻碍, 直到完全扩展到两片石墨烯界面, 如图 4(d) 所示. 在第 IV 阶段, 裂纹形状为矩形, 其长度几乎在 6.24 nm 保持一定范围内波动, 这个长度和石墨烯之间的距离 6.28 nm 相近, 更可以说明石墨烯对裂纹的限制作用, 但是矩形宽度随着拉伸而不断增大, 如图 4(e) 所示. 值得注意的是, 在拉伸过程中两片石墨烯之间铝基体原子失配度较小, 能够很好地保持原子结构完整性, 但石墨烯无裂纹侧产生大量缺陷. 插图是对图 4(e) 中产生部分缺陷进行的 CNA 分析, 可以看到缺陷主要由层错和无序结构组成. 石墨烯在阻碍裂纹扩展的同时也作为保护墙保护石墨烯之间铝基体结构完整性.

从图 3(a) 和图 4(a) 的裂纹长度随应变变化曲线中可以看出, 在拉伸结束后纯铝和 p-Gr/Al 的

裂纹长度分别为 7.93 nm 和 6.25 nm, p-Gr/Al 的裂纹长度要比纯铝裂纹长度降低 21.18%. 显然, 无限长石墨烯对裂纹扩展具有抑制作用. 接下来, 本文将进一步研究有限长度石墨烯对 Gr/Al 复合材料裂纹扩展的影响.

### 3.2 不同长度石墨烯对 Gr/Al 裂纹扩展的影响

为了研究石墨烯尺寸对 Gr/Al 复合材料裂纹扩展行为的影响, 图 5(a) 给出了不同长度石墨烯的 Gr/Al 的裂纹长度-应变曲线. 从图 5(a) 中可以发现, 不同长度石墨烯对裂纹扩展影响也不同. 在初期应变达到 7.45% 之前, 裂纹长度曲线基本重合, 裂纹未发生扩展. 而在拉伸的中后期, 因石墨烯与裂纹作用不同而对裂纹扩展的影响也产生了差异. 当拉伸应变达到 20%, 石墨烯尺寸  $l \leq 3.35$  nm 的 Gr/Al 复合材料的裂纹长度远高于纯铝在该应变下的裂纹长度, 并且裂纹长度随着  $l$  的增大而减小. 对于  $l > 3.35$  nm 的 Gr/Al, 其在 20% 时裂纹长度均低于纯铝在该应变下的裂纹长度. 为衡量石墨烯尺寸对 Gr/Al 裂纹扩展的影响, 引入了裂纹比  $\phi$  进行分析:

$$\phi = \frac{a_{\text{Gr/Al}} - a_{\text{Al}}}{a_{\text{Al}}}, \quad (6)$$

式中,  $a_{\text{Gr/Al}}$ ,  $a_{\text{Al}}$  分别为 Gr/Al 和纯铝材料在 20% 应变时或断裂时的裂纹长度. 当  $\phi > 0$  时, 表明石墨烯促进裂纹扩展,  $\phi = 0$  时, 为纯铝材料的裂纹比,  $\phi < 0$  意味着石墨烯对裂纹扩展有抑制作用.

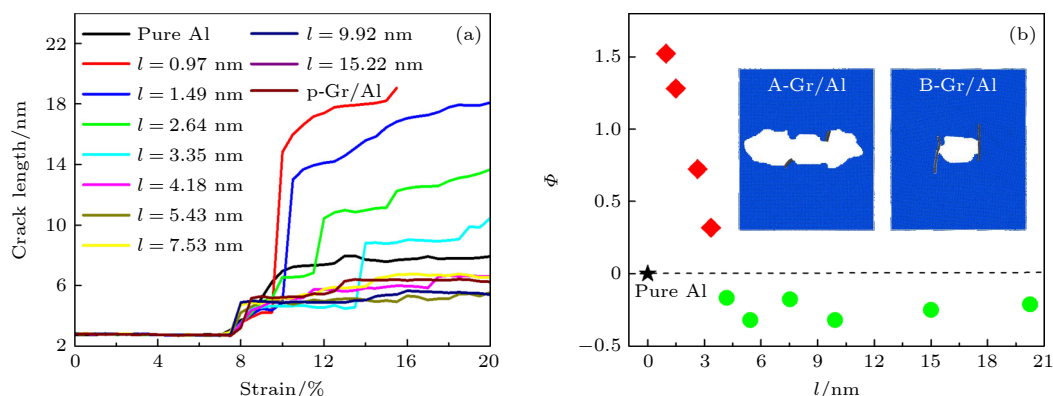


图 5 (a) 不同长度石墨烯 Gr/Al 复合材料的裂纹长度-应变曲线; (b) Gr/Al 复合材料的裂纹比随石墨烯嵌入长度的变化 (插图中 A-Gr/Al 和 B-Gr/Al 分别为 A-Gr/Al-2 和 B-Gr/Al-2 模型在 20% 时原子结构图)

Fig. 5. (a) Crack length-strain curves of Gr/Al composites with different length of graphene (In the inset, A-Gr/Al and B-Gr/Al are atomic structure diagrams of A-Gr/Al-2 and B-Gr/Al-2 models at 20%, respectively).

用. 通过 (6) 式的计算, 本节发现当  $l \leq 3.35$  nm 时,  $\phi > 0$ ; 当  $l > 3.35$  nm 时,  $\phi < 0$ .  $\phi-l$  的曲线如图 5(b) 所示. 为了表述方便, 将  $l \leq 3.35$  nm 的 Gr/Al 定义为 A-Gr/Al (对裂纹扩展有促进作用),  $l > 3.35$  nm 的 Gr/Al 定义为 B-Gr/Al (对裂纹扩展有抑制作用). 从 A 类 Gr/Al 的裂纹比可以看到  $\phi$  随  $l$  的增加而降低. B 类 Gr/Al 的裂纹比在一定范围内波动且趋近于 p-Gr/Al 的裂纹比. 图 5(b) 中两种类型的裂纹扩展失效形态图可以清晰的看的 A-Gr/Al 的裂纹长度远大于 B-Gr/Al 的裂纹长度. B-Gr/Al 的裂纹两侧可以看的石墨烯对裂纹的限制. 接下来对 A-Gr/Al 和 B-Gr/Al 两种类型复合材料在单轴拉伸下的裂纹扩展行为进行详细分析.

### 3.2.1 A-Gr/Al 的裂纹扩展

在本节选择 A-Gr/Al-2 进行分析. 为了研究在拉伸过程, 石墨烯对 Gr/Al 复合材料裂纹扩展行为的影响, 图 6(a) 和图 6(b) 给出了 A-Gr/Al-2 复合材料的应力-应变和位错密度 ( $\rho$ )-应变曲线. 从图 6(a) 中看到, A-Gr/Al-2 变形过程分为两个

阶段: 在  $a_1$  点以前为弹性阶段, 材料屈服应力为 4.33 GPa, 也是位错形核所需的应力; 第二阶段为  $a_1$  点以后的塑性变形阶段, 位错形核生长, 位错密度在拉伸过程激增后急速降低, 如图 6(b) 所示. 为了分析石墨烯对 A-Gr/Al 裂纹扩展得影响, 取图 6(a) 中应变为  $a_1 = 7.42\%$ ,  $a_{11} = 7.72\%$ ,  $a_{12} = 8.18\%$ ,  $a_2 = 9.22\%$ ,  $a_3 = 12.73\%$ ,  $a_4 = 18.53\%$  不同时刻基体进行应力及位错分析如图 6(c) 和图 6(d) 所示. 在图 6(c) 中  $a_1$  点可以看到, 裂纹尖端达到应力集中, 且这个时刻的 DXA (dual energy X-ray absorptiometry) 分析 (图 6(b)) 中发现没有位错产生. 图 6(a) 在弹性阶段结束后, 应力小幅度下降到  $a_{11}$  点. 对  $a_{11}$  点进行 DXA 分析, 如图 6(d) 所示在该应变下产生  $1/6\langle 112 \rangle$  的肖克莱部分位错和其他位错, 位错的滑移导致应力下降. 此外, 石墨烯端部与铝基体产生亚裂纹 (如图 6(d) 中黑色圆圈). 随着应变增大, 材料的应力小幅度提升至  $a_{12}$  点, 应力为 4.03 GPa. 从  $a_{12}$  点对应的图 6(d) 中发现, 基体产生了  $1/6\langle 110 \rangle$  的梯杆位错, 梯杆位错

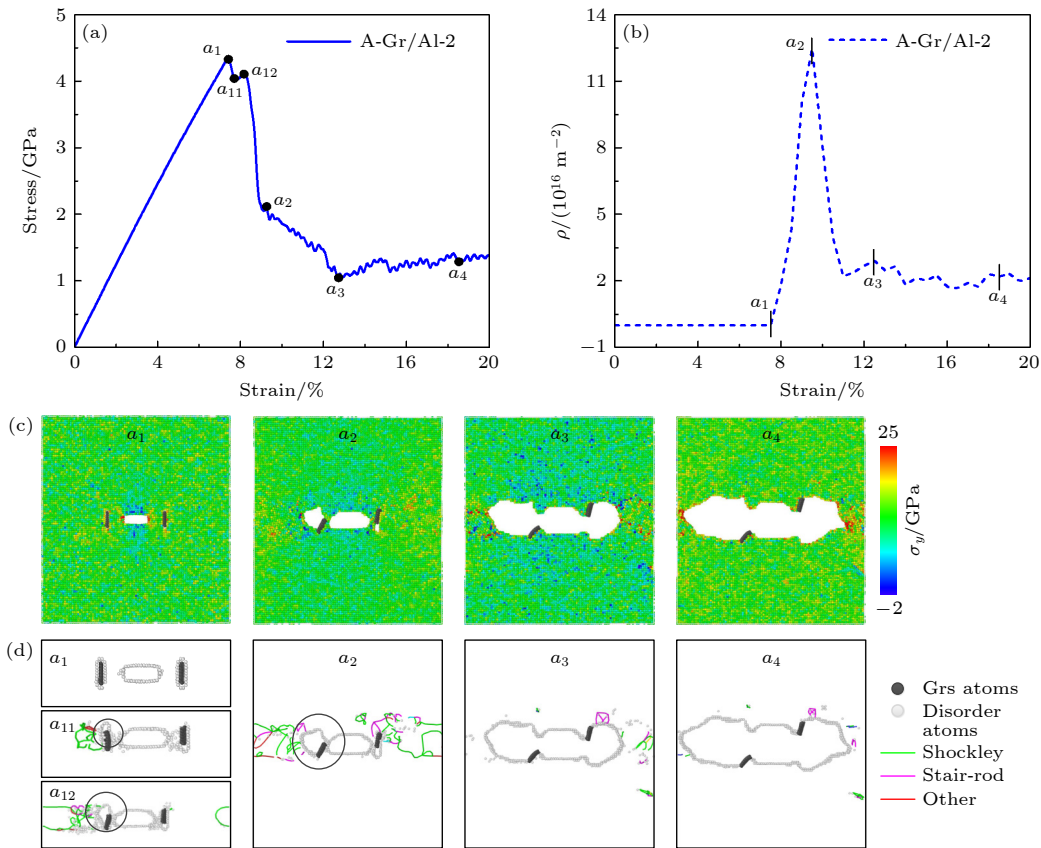


图 6 A-Gr/Al-2 的裂纹扩展 (a) 应力-应变曲线; (b) 位错密度-应变曲线; (c)  $a_1$ — $a_4$  的  $\sigma_y$  瞬时应力分布图; (d) 位错线分布图  
Fig. 6. Evolution of A-Gr/Al-2 crack growth: (a) Stress-strain curve; (b) dislocation density-strain curve; (c) instantaneous stress distribution of  $\sigma_y$  for  $a_1$ — $a_4$ ; (d) distributions of dislocation lines.



可以阻碍其他位错的运动,但含量较少,硬化作用较弱,因此对应力增长影响较小.当应变达到 $a_2$ 点,亚裂纹扩展使石墨烯与铝基界面脱离(如图6(d)中黑色圆圈所示),并且亚裂纹和石墨烯-铝基界面发射大量位错,导致应力急速下降.从图6(d)中可以看出,位错主要类型为肖克莱部分位错和梯杆位错,它们相互作用构成位错网络主导塑性变形.当应变达到 $a_3$ 点,对应的图6(d)中可以看出,主裂纹和亚裂纹快速扩展使得铝基体大部分位错因它们合并而消失.在图6(d)中的 $a_4$ 点,裂纹扩展接近铝基体边缘,只有少量位错存在铝基体中.在A-Gr/Al-2在单轴拉伸过程中,石墨烯与铝基界面剥离产生的亚裂纹快速生长与主裂纹的合并加速了材料断裂.

### 3.2.2 B-Gr/Al 的裂纹扩展

由于B-Gr/Al类裂纹扩展趋势类似,因此选择B-Gr/Al-2为例进行分析.在图7(a)中,当应变达到7.63%,屈服应力达到4.43 GPa,比A-Gr/Al-2

的屈服应力高2.3%,可以看出不同长度石墨烯对材料的屈服应力影响不明显.图7(b)给出B-Gr/Al-2的位错密度随应变的变化曲线,在弹性阶段不产生位错;在塑性变形期位错密度逐步增加后趋于稳定,其变化趋势与Zheng等<sup>[37]</sup>研究的位错在塑性变形阶段变化一致.图7(c)—(d)为图7(a)中不同应变下 $b_1 = 7.63\%$ ,  $b_{11} = 7.93\%$ ,  $b_2 = 9.33\%$ ,  $b_3 = 13.98\%$ ,  $b_4 = 18.28\%$ 的应力及位错分析. $b_1$ 点为弹性变形阶段终点,在裂纹附近可以明显看到拉应力和压应力集中,如图7(c)所示.从图7(b)和图7(d)中可以看出,在 $b_1$ 点之前不产生任何位错.从图7(a)中看到弹性阶段结束后,在 $b_{11}$ 处应力小幅度下降,主要是因为 $1/6\langle 110 \rangle$ 的梯杆位错开始形核,位错形核释放了局部应力从而导致应力下降,这与Rong等<sup>[38]</sup>的研究结果一致.随着应变增加,应力急速下降到 $b_2$ 点,应力的下降伴随着位错密度的增长.在图7(c)中对应的 $b_2$ 点可以看到,位错的增殖和滑移使得裂纹尖端集中的应力得以释放.图7(d)给出 $b_2$ 点位错由石墨烯界面和亚裂纹

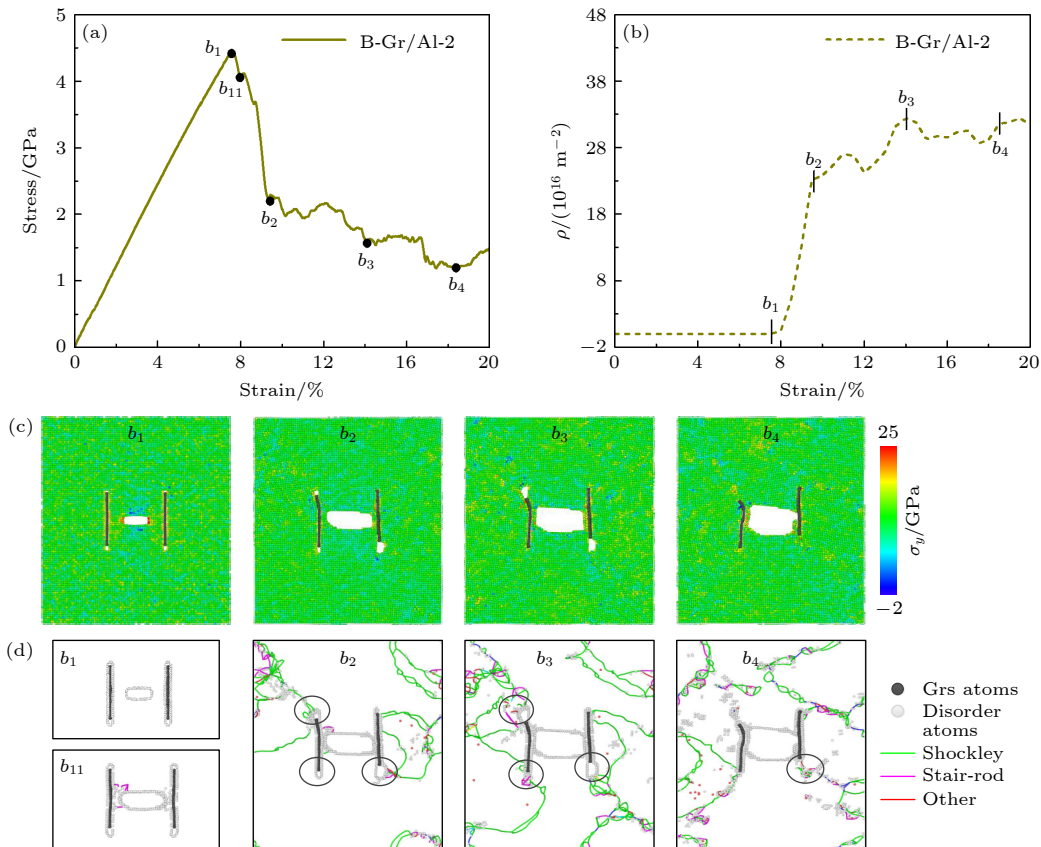


图7 B-Gr/Al-2的裂纹扩展运动 (a) 应力-应变曲线; (b) 位错密度-应变曲线; (c)  $b_1$ — $b_4$ 的瞬时 $\sigma_y$ 应力图; (d) 位错线分布  
Fig. 7. Evolution of B-Gr/Al-2 crack growth behavior: (a) Stress-strain curve; (b) dislocation density-strain curve; (c)  $\sigma_y$  distribution of  $b_1$  to  $b_4$ ; (d) distributions of dislocation lines.



处形核生长, 肖克莱部分位错主导塑性变形, 并且亚裂纹处产生的位错运动到石墨烯界面就被阻碍, 保证了石墨烯中间铝基体结构完整性. 随着应变的增加, 应力持续下降, 位错密度不断增大. 应变达到  $b_3$  点, 可以看到裂纹形状为矩形, 裂纹尖端钝化, 且应力分布较为均匀, 位错主要分布在石墨烯无裂纹侧并被石墨烯阻碍, 与图 4(e) 中石墨烯阻碍位错作用类似. 在  $b_4$  点观察到钝化裂纹沿石墨烯界面扩展, 水平方向上受到石墨烯的限制, 如该点对应的图 7(c) 中所示. 对  $b_4$  点进行位错分析发现, 位错与石墨烯相互作用, 位错网络不断复杂化, 但石墨烯之间铝基体结构保持较为完整, 裂纹处没有任何位错产生. 拉伸结束后, 不同于 A-Gr/Al 中位错随着断裂失效而减少, B-Gr/Al 的大部分位错仍保留在铝基体. 需要注意的是, 在 B-Gr/Al-2 拉伸变形过程中也产生亚裂纹, 如图 7(d) 的黑框所示, 与 A-Gr/Al 不同的是亚裂纹生长并不迅速, 反而在拉伸过程受铝基体挤压消失, 消失的亚裂纹周围会产生无序结构原子, 并且产生新的位错.

在 A-Gr/Al 复合材料中, 石墨烯与铝基体产生的亚裂纹急速扩展后, 与中心裂纹合并达到促进裂纹扩展的作用. 在 B-Gr/Al 复合材料中, 石墨烯钝化裂纹尖端, 中断裂纹尖端的位错发射, 阻碍了亚裂纹处产生的位错滑移到石墨烯之间铝基体, 从而达到抑制裂纹扩展的作用.

### 3.3 石墨烯分布对裂纹扩展的影响

#### 3.3.1 石墨烯分布位置对裂纹扩展影响

为了研究在拉伸阶段, 石墨烯分布位置对 Gr/Al

复合材料裂纹扩展的影响, 选择 A-Gr/Al-2 和 B-Gr/Al-1 复合材料, 研究石墨烯与裂纹相对距离 ( $\delta$ ) 在 1.72—4.96 nm 范围内对裂纹扩展运动进行分析. 图 8(a) 给出了不同  $\delta$  的 A-Gr/Al-2 复合材料在和纯铝 6 个模型的裂纹长度与应变的关系曲线. 不同  $\delta$  的 A-Gr/Al-2 模型在应变为 20% 时的裂纹长度均高于纯铝的裂纹长度, 对裂纹扩展都有促进作用, 且随石墨烯与裂纹的相对位置的增大促进作用减弱. 在 A-Gr/Al-2 系列中选  $\delta = 2.53$  nm 的代表性模型进行分析. 图 8(b) 给出  $\delta$  为 2.53 nm 的 A-Gr/Al-2 的位错密度随应变的变化以及特殊点位错分布. 当应变达到  $c_1$  点, 弹性阶段结束, 无位错产生. 进入塑性变形阶段, 石墨烯与铝基界面分离产生的亚裂纹处发射位错并且迅速扩展, 使得位错密度急速增长. 当应变增加到  $c_3$  点, 主裂纹和亚裂纹合并导致材料失效, 位错密度也显著降低. 裂纹扩展形态和位错分布与先前研究的 A-Gr/Al 的裂纹扩展行为相似.

图 9(a) 为  $\delta$  在 1.72—4.96 nm 范围内的 B-Gr/Al-1 复合材料的裂纹长度随应变变化曲线. 图 9(a) 中 B-Gr/Al-1 系列模型在应变为 20% 时的裂纹长度均低于纯铝的裂纹长度, 都对裂纹扩展有抑制作用. 以  $\delta = 3.34$  nm 的 B-Gr/Al-1 复合材料为代表进行详细分析. 图 9(b) 中弹性阶段持续到  $d_1$  点, 弹性阶段不产生任何位错. 进入塑性阶段后, 位错萌生, 位错密度急剧增长. 图 9(b) 的  $d_2$  点给出位错主要由裂纹尖端以及石墨烯界面产生, 肖克莱部分位错和梯杆位错相互作用构成位错网络主导塑性变形. 图 9(c) 对应的  $d_2$  点的结构分析图可以看

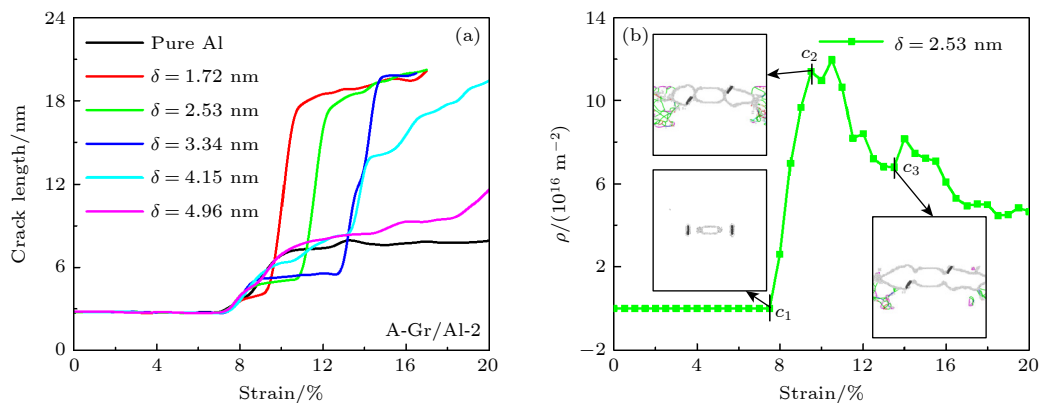


图 8 (a) A-Gr/Al-2 复合材料在  $\delta$  为 1.72—4.96 nm 范围内的裂纹长度-应变曲线; (b)  $\delta$  为 2.53 nm 的 A-Gr/Al-2 复合材料位错密度的演化

Fig. 8. (a) Crack propagation in the  $\delta$  range of 1.72—4.96 nm for A-Gr/Al-2 composites; (b) dislocation density evolution in the  $\delta = 2.53$  nm for A-Gr/Al-2 composite.

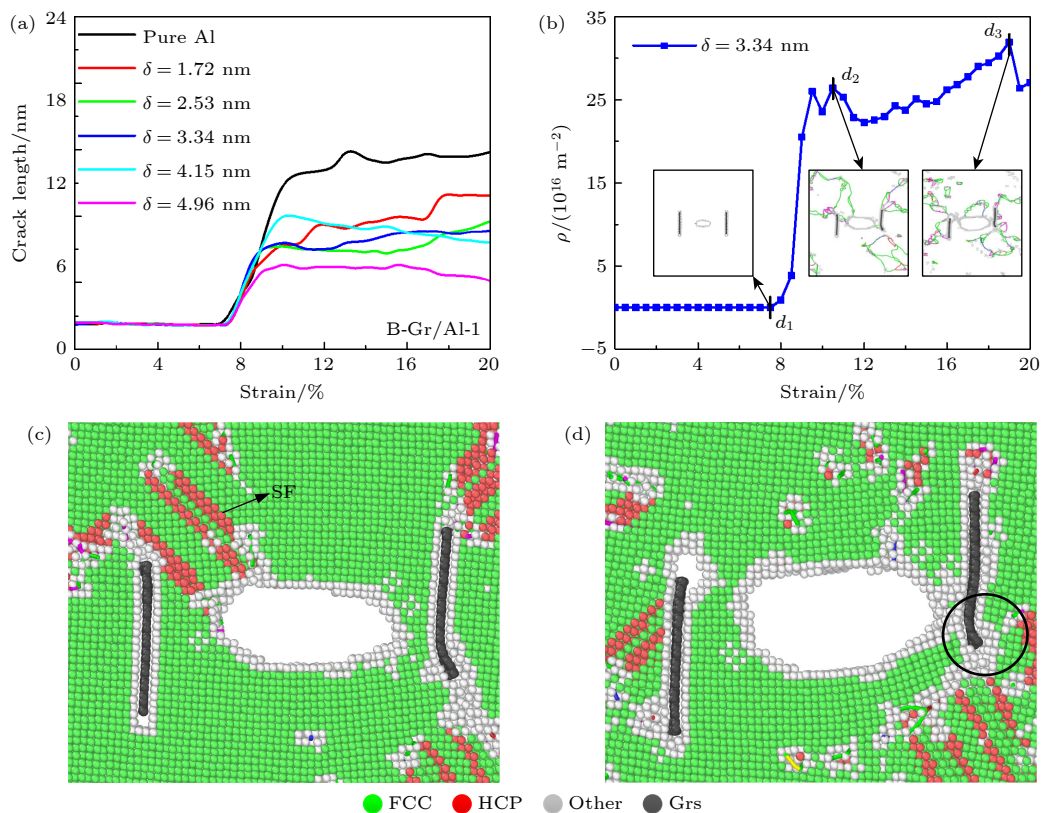


图 9 (a) B-Gr/Al-1 复合材料在  $\delta$  为 1.72—4.96 nm 范围内的裂纹长度-应变曲线; (b)  $\delta$  为 3.34 nm 的 B-Gr/Al-1 复合材料位错密度的演化; (c), (d) 对应的  $d_2$  和  $d_3$  原子结构图

Fig. 9. (a) Crack propagation in the  $\delta$  range of 1.72—4.96 nm for B-Gr/Al-1; (b) dislocation density evolution in the  $\delta = 3.34$  nm for B-Gr/Al-1 composite; (c), (d) corresponding to  $d_2$  and  $d_3$  atomic structure.

到, 裂纹尖端受到层错阻碍而钝化, 使得裂纹扩展被抑制. 裂纹附近以及石墨烯发生变形的端部都产生大量无序结构原子, 这种无序原子结构也会促使新的位错以及层错的产生. 当应变达到  $d_3$  点, 钝化裂纹的扩展更倾向沿拉伸方向扩展. 从图 9(b) 中对应的  $d_3$  点位错分布图中看到, 石墨烯对位错的阻碍作用依然存在, 但对裂纹的阻碍作用并不明显, 裂纹尖端扩展到石墨烯界面之前就被钝化. 对于  $d_3$  点的原子结构分析如图 9(d) 所示, 钝化裂纹尖端周围的无序原子成为其主要阻碍因素. 这与在之前讨论的 B-Gr/Al-2 是有区别的. 意味着当  $\delta$  增大后, 裂纹扩展过程中石墨烯与裂纹的相互作用减弱, 但层错和无序结构原子会钝化裂纹尖端从而阻碍裂纹扩展.

### 3.3.2 石墨烯分布角度对裂纹扩展的影响

由于裂纹的产生具有随机性, 很难保证其与石墨烯相互垂. 因此, 本节讨论了石墨烯分布角度对裂纹扩展的影响. 本节分别从 A 类和 B 类 Gr/Al

复合材料中选择石墨烯尺寸为 1.49 nm 和 5.43 nm 的模型进行研究. 图 10(a)—(c) 分别为石墨烯长度为 1.49 nm 的复合材料在石墨烯分布角度为  $0^\circ$ ,  $45^\circ$  和  $90^\circ$  时裂纹扩展形貌. 从图 10 中可以看到, 随着拉伸的进行, 不同角度的石墨烯与铝基界面分离形成亚裂纹, 并且与主裂纹汇合使得裂纹快速扩展至失效, 这一现象与 3.2.1 节中图 6 相似. 值得注意的是, 不同角度对于石墨烯附近产生亚裂纹时的应变并不相同, 分布角度为  $0^\circ$  时界面分离应变最小, 应变为 8%. 石墨烯分布角度为  $45^\circ$  和  $90^\circ$  的界面开始分离时的应变均为 8.5%, 但是角度为  $90^\circ$  时产生的亚裂纹面积要比  $0^\circ$  和  $45^\circ$  产生的亚裂纹面积要小. 图 10 中石墨烯分布角为  $0^\circ$ ,  $45^\circ$  和  $90^\circ$  的模型在主亚裂纹汇合时对应应变分别对应 9%, 9.5% 和 10.5%, 应变随着分布角度的增加而增加. 主亚裂纹汇合后导致裂纹扩展迅速, 其中石墨烯长度为 1.49 nm 的 Gr/Al 材料, 在分布角度为  $0^\circ$  时亚裂纹扩展最快, 材料在应变为 12% 时材料就发生了断裂, 而角度为  $45^\circ$  和  $90^\circ$  则扩展地相对缓慢.



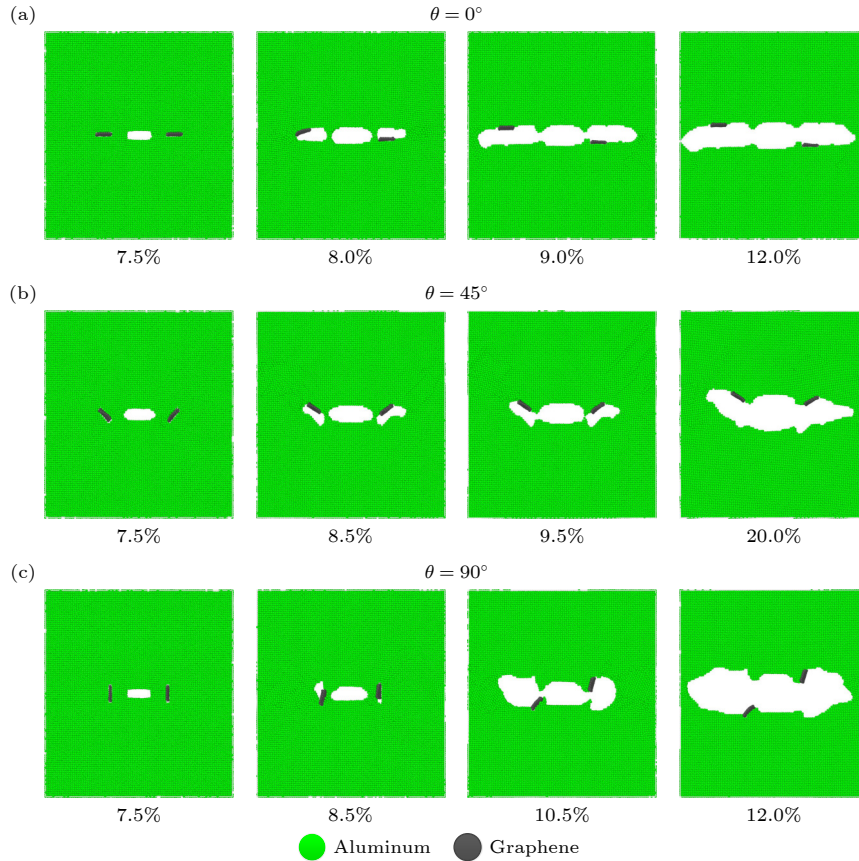


图 10 石墨烯尺寸为 1.49 nm 的 Gr/Al 复合材料的裂纹扩展 (a)  $\theta = 0^\circ$ ; (b)  $\theta = 45^\circ$ ; (c)  $\theta = 90^\circ$

Fig. 10. Crack propagation of Gr/Al composite with graphene length of 1.49 nm: (a)  $\theta = 0^\circ$ ; (b)  $\theta = 45^\circ$ ; (c)  $\theta = 90^\circ$ .

产生这一现象的主要原因是  $0^\circ$  分布角的石墨烯与铝基体接触水平面积更大, 受拉后亚裂纹沿界面扩展的面积也更大导致裂纹迅速扩展至断裂.

图 11(a)–(c) 为石墨烯尺寸为 5.43 nm 的 Gr/Al 模型在石墨烯分布角度为  $0^\circ$ ,  $45^\circ$  和  $90^\circ$  时裂纹扩展形貌. 从图 11(a) 中可以看到, 分布角度为  $0^\circ$  时, 裂纹扩展迅速, 并且裂纹扩展路径与图 10(a) 相似, 均由石墨烯界面产生亚裂纹快速扩展与主裂纹汇合导致材料断裂. 在石墨烯分布角度为  $0^\circ$  时, 石墨烯尺寸为 5.43 nm 的模型比石墨烯尺寸为 1.49 nm 的 Al/Gr 模型裂纹扩展速度更快, 在应变为 10% 时材料就已断裂. 通过对比图 11(a) 和图 11(b) 中石墨烯分布角度为  $0^\circ$  和  $45^\circ$  在应变为 10% 时裂纹长度, 发现  $0^\circ$  模型的中心裂纹扩展要比  $45^\circ$  模型的裂纹长度要长, 说明  $0^\circ$  模型裂纹扩展速度更快. 对于  $45^\circ$  的模型的亚裂纹在应变达到 15% 时才产生, 随着拉伸继续进行, 亚裂纹沿分布角为  $45^\circ$  的石墨烯界面扩展直至断裂. 石墨烯的分布角度有效的改变了裂纹扩展的路径. 对于石墨烯分布角度为

$90^\circ$  时, 如图 11(c) 所示, 可以看到石墨烯有效地阻碍裂纹扩展, 这与 3.2.2 节裂纹扩展是一样的, 在这里就不再赘述.

对于两个模型的不同分布角度裂纹扩展程度以及裂纹扩展路径进行分析和总结. 如图 12(a) 和图 12(b) 所示, 两个尺寸模型在石墨烯分布角度为  $0^\circ$  和  $45^\circ$  时, 裂纹比相近, 并且裂纹扩展路径沿石墨烯界面扩展. 石墨烯的分布角度可以有效的改变裂纹扩展路径. 当石墨烯分布角度为  $90^\circ$  时, 石墨烯尺寸为 1.49 和 5.43 nm 的裂纹比相差 1.58, 且裂纹扩展路径也不相同. 如图 12(b) 中所示, 对于石墨烯长为 1.49 nm 的 Gr/Al 复合材料, 石墨烯与铝基接触面积小, 易产生亚裂纹, 主亚裂纹汇合后裂纹沿垂直拉伸方向扩展; 而石墨烯长为 5.43 nm 的 Gr/Al 复合材料由于石墨烯长度较长, 阻碍了裂纹扩展, 使得裂纹扩展方向向上, 因此其裂纹比低于 0, 并对裂纹扩展有一定抑制作用. 石墨烯分布角度有效地改变了裂纹扩展路径.



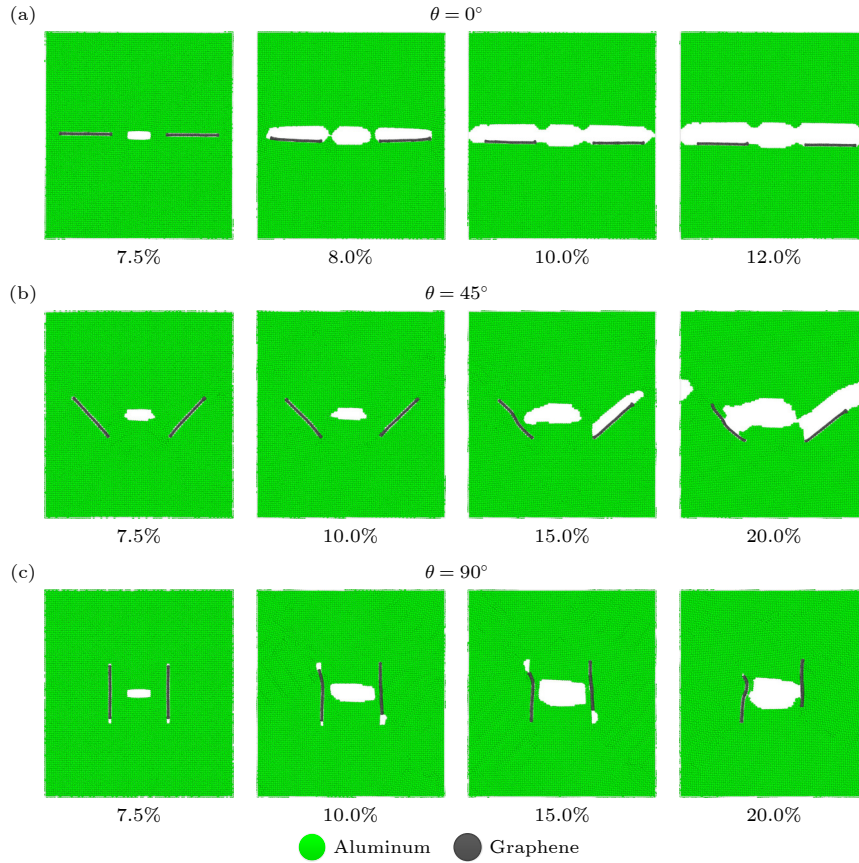


图 11 石墨烯尺寸为 5.43 nm 的 Gr/Al 复合材料的裂纹扩展 (a)  $\theta = 0^\circ$ ; (b)  $\theta = 45^\circ$ ; (c)  $\theta = 90^\circ$ .  
Fig. 11. Crack propagation of Gr/Al composite with graphene length of 5.43 nm: (a)  $\theta = 0^\circ$ ; (b)  $\theta = 45^\circ$ ; (c)  $\theta = 90^\circ$ .

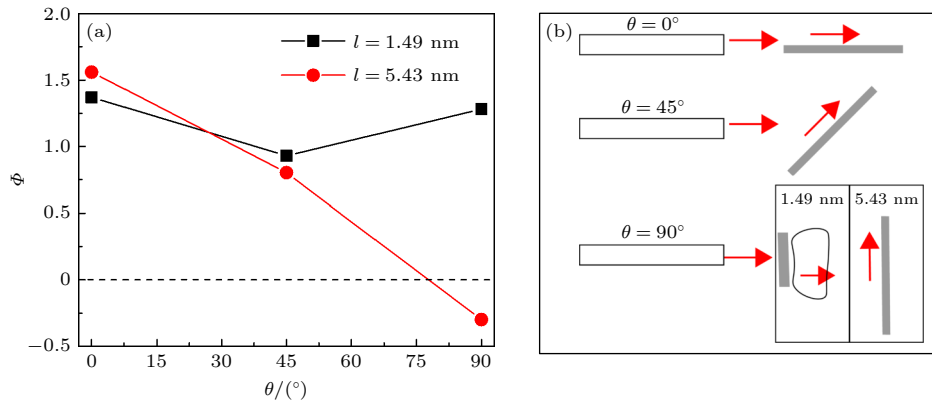


图 12 (a) 石墨烯尺寸为 1.49 和 5.43 nm 的 Gr/Al 复合材料的裂纹比-分布角度曲线图; (b) 不同分布角度 Gr/Al 的裂纹扩展路径  
Fig. 12. (a) Crack ratio-direction angle curves of Gr/Al composites with graphene lengths of 1.49 and 5.43 nm; (b) crack propagation paths for different direction angle of Gr/Al composite.

## 4 结 论

本文采用分子动力学方法研究了不同尺寸石墨烯和石墨烯与裂纹的相对位置对 Gr/Al 复合材料裂纹扩展行为的影响。

1) 对于周期性边界条件下, 石墨烯/铝基复合

材料在拉伸过程中抗裂纹性主要归因于: 两石墨烯薄片起到了阻碍墙作用, 从而阻挡裂纹扩展。

2) 不同有限长度石墨烯对 Gr/Al 复合材料的裂纹扩展的影响存在临界值 (3.35 nm). 对于  $l \leq 3.35$  nm 的 A 类 Gr/Al 复合材料在拉伸过程中, 石墨烯促进裂纹扩展, 这是因为亚裂纹周围发生大量位错促进了亚裂纹的生长, 亚裂纹与主裂纹

合并从而促进裂纹扩展. 而  $l > 3.35$  nm 的 B 类 Gr/Al 复合材料中, 石墨烯阻挡裂纹扩展, 从而达到抑制裂纹的作用, 并且石墨烯能够阻碍位错滑移, 保护石墨烯之间铝基体结构完整性.

3) 随着石墨烯与裂纹距离的增加, A 类 Gr/Al 复合材料中石墨烯对裂纹扩展的促进作用减弱是因为石墨烯尺寸较小, 其与裂纹距离越远对裂纹扩展影响越小. 而 B 类 Gr/Al 复合材料中石墨烯对裂纹扩展的抑制作用对于石墨烯与裂纹的相对距离的改变不敏感, 不仅由于石墨烯的存在阻碍裂纹扩展, 拉伸过程产生的层错和有序结构原子也会钝化裂纹尖端, 从而达到抑制效果.

4) 石墨烯与铝基体的剥离产生的亚裂纹与主裂纹汇合后会促进裂纹扩展, 并且随着石墨烯分布角度的不同而改变裂纹扩展路径. 石墨烯分布角度垂直拉伸方向更能抑制裂纹扩展, 这为研究石墨烯/铝基复合材料断裂提供一定参考依据.

## 参考文献

- [1] Singh S, Garg M, Batra N K 2015 *Tribol. Trans.* **58** 758
- [2] Hu Z, Tong G, Lin D, Chen C, Guo H, Xu J, Zhou L 2016 *Mater. Sci. Technol.* **32** 930
- [3] Jayendra B, Sumanth D, Dinesh G, Rao M V 2020 *Mater. Today:Proc.* **21** 1104
- [4] Zhang X, Zhao N, He C 2020 *Prog. Mater. Sci.* **113** 100672
- [5] Novoselov K S, Fal'ko V I, Colombo L, Gellert P R, Schwab M G, Kim K 2012 *Nature* **490** 192
- [6] Dai Z, Hou Y, Sanchez D A, Wang G, Brennan C J, Zhang Z, Liu L, Lu N 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 266101
- [7] Dai Z, Liu L, Zhang Z 2019 *Adv. Mater.* **31** 1805417
- [8] Fan B-B, Guo H-H, Li W, Jia Y, Zhang R 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 148101 (in Chinese) [范冰冰, 郭焕焕, 李稳, 贾瑜, 张锐 2013 物理学报 **62** 148101]
- [9] Stankovich S, Dikin D A, Dommett G H, Kohlhaas K M, Zimney E J, Stach E A, Piner R D, Nguyen S T, Ruoff R S 2006 *Nature* **442** 282
- [10] Zhang P, Ma L, Fan F, Zeng Z, Peng C, Loya P E, Liu Z, Gong Y, Zhang J, Zhang X, Ajayan P M, Zhu T, Lou J 2014 *Nat. Commun.* **5** 3782
- [11] Yang Z, Wang D, Lu Z, Hu W 2016 *Appl. Phys. Lett.* **109** 191909
- [12] Galashev A Y, Rakhmanova O R 2020 *Phys. Lett. A* **384** 126790
- [13] Wegst U G, Bai H, Saiz E, Tomsia A P, Ritchie R O 2015 *Nat. Mater.* **14** 23
- [14] Zhang Y, Li X 2017 *Nano Lett.* **17** 6907
- [15] Li Z, Guo Q, Li Z, Fan G, Xiong D B, Su Y, Zhang J, Zhang D 2015 *Nano Lett.* **15** 8077
- [16] Kim Y, Lee J, Yeom M S, Shin J W, Kim H, Cui Y, Kysar J W, Hone J, Jung Y, Jeon S, Han S M 2013 *Nat. Commun.* **4** 2114
- [17] Zhou X, Liu X, Shang J, Yang Q 2020 *Mech. Mater.* **148** 103530
- [18] Zhu J Q, Yang Q S, Liu X 2019 *Key Eng. Mater.* **804** 1
- [19] Muller S E, Santhapuram R R, Nair A K 2018 *Comput. Mater. Sci.* **152** 341
- [20] Su Y, Xu S 2016 *Mater. Sci. Eng.* **A 678** 153
- [21] Qiu R Z, Li C C, Fang T H 2017 *Phys. Scr.* **92** 085702
- [22] Akbarian S, Dehghani K 2020 *Int. J. Fatigue* **135** 105570
- [23] Plimpton S 1995 *J. Comput. Phys.* **117** 1
- [24] Wang P, Yang X, Tian X 2015 *J. Mater. Res.* **30** 709
- [25] Zhang C, Lu C, Pei L, Li J, Wang R, Tieu K 2019 *Carbon* **143** 125
- [26] Daw M S, Baskes M I 1984 *Phys. Rev. B* **29** 6443
- [27] Brenner D W, Shenderova O A, Harrison J A, Stuart S J, Ni B, Sinnott S B 2002 *J. Phys. Condens. Matter* **14** 783
- [28] Silvestre N, Faria B, Canongia Lopes J N 2014 *Compos. Sci. Technol.* **90** 16
- [29] Han R Q, Song H Y, An M R, Li W W, Ma J L 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 066201 (in Chinese) [汉芮岐, 宋海洋, 安敏荣, 李卫卫, 马佳丽 2021 物理学报 **70** 066201]
- [30] Kumar S 2018 *Mater. Chem. Phys.* **208** 41
- [31] Munilla J, Castro M, Carnicero A 2009 *Phys. Rev. B* **80** 024109
- [32] Kutana A, Giapis K P 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 245501
- [33] Stukowski A 2010 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **18** 015012
- [34] Kelchner C, Plimpton S, Hamilton J 2000 *Phys. Rev. B* **58** 11085
- [35] Faken D, Jónsson H 1994 *Comput. Mater. Sci.* **2** 279
- [36] Stukowski A, Bulatov V V, Arsenlis A 2012 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **20** 085007
- [37] Zheng Y G, Zhang H W, Chen Z, Lu C, Mai Y W 2009 *Phys. Lett. A* **373** 570
- [38] Rong Y, He H P, Zhang L, Li N, Zhu Y C 2018 *Comput. Mater. Sci.* **153** 48

# Effects of graphene size and arrangement on crack propagation of graphene/aluminum composites<sup>\*</sup>

Wei Ning<sup>1)</sup> Zhao Si-Han<sup>1)</sup> Li Zhi-Hui<sup>2)3)†</sup> Ou Bing-Xian<sup>4)</sup>  
Hua An-Ping<sup>1)</sup> Zhao Jun-Hua<sup>1)‡</sup>

1) (*Jiangsu Key Laboratory of Advanced Food Manufacturing Equipment and Technology, Jiangnan University, Wuxi 214122, China*)

2) (*Aerodynamics Research and Development Center, Mianyang 621000, China*)

3) (*National Laboratory for Computational Fluid Dynamics, Beijing 100191, China*)

4) (*National Graphene Products Quality Supervision and Inspection Center, Special Equipment Safety Supervision Inspection Institute of Jiangsu Province, Wuxi 214174, China*)

( Received 30 November 2021; revised manuscript received 7 March 2022 )

## Abstract

Aluminum-based composite material is one of the most important candidate materials in the mechanical industry and aerospace engineering due to its light weight and high strength. Graphene is an ideal reinforcement for composite materials for its excellent mechanical properties. Till-now, the contribution of graphene sheets in the process of crack propagation in composites is not clear. In present work, the effects of graphene size and distribution in graphene/aluminum composites are explored using molecular dynamics simulation methods. It is found that when the length of graphene flake is less than 3.35 nm, the generated sub-cracks in the composite is benefit to the crack propagation. This effect reduces the mechanical properties of composite. When the length of graphene flake is greater than 3.35 nm, graphene sheet impedes the crack propagation and dislocates slip at sub-cracks. In addition, the distribution of graphene flakes angle changes the crack propagation path. Our findings also provide insights into ways to optimize mechanical properties of graphene/aluminum composites.

**Keywords:** graphene, aluminum matrix composites, crack propagation, molecular dynamics simulation

**PACS:** 47.11.Mn, 62.25.-g, 81.70.Bt

**DOI:** 10.7498/aps.71.20212203

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11502217), and the Manned Space Engineering Technology “Development of Large-scale Spacecraft Flight and Reentry Surveillance and Prediction System”, China (Grant No. 2020-ZKZX-5011).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [zhli0097@x263.net](mailto:zhli0097@x263.net)

<sup>‡</sup> Corresponding author. E-mail: [junhua.zhao@163.com](mailto:junhua.zhao@163.com)