● 试验研究 Experimental Research ●

DOI:10.16410/j.issn1000-8365.2024.4191

碳纳米管和石墨烯增强铝基复合材料纳米压痕分子动力学模拟

舒巧囡,贾振东,曹 谦,李金山,陈 彪

(西北工业大学 凝固技术国家重点实验室,陕西 西安 710072)

摘 要:碳纳米管(CNT)和石墨烯(Gr)分别是一维和二维碳纳米材料的代表,是金属基复合材料(MMCs)中常用的两种增强材料。通过对相同结构的 CNT 和 Gr 增强铝(Al)基复合材料(即 CNT/Al 和 Gr/Al)的纳米压痕行为进行分子动力学模拟,探究 CNT 和 Gr 对铝基复合材料的抗压增强效果与压痕变形行为。结果表明,Gr/Al 在纳米压痕过程中的塑性变形量明显小于 CNT/Al, 而 CNT/Al 在压痕深度较大时会出现 CNT 凹陷行为。Gr 对于位错的阻碍作用明显优于 CNT,且 Gr/Al 中的不可动位错比例随压痕深度增加而增大,能够进一步提高位错强化作用。因此,Gr/Al 的综合抗压性能和阻碍基体发生较大形变的能力要优于 CNT/Al。

关键词:碳纳米管;石墨烯;铝基复合材料;分子动力学模拟;纳米压痕

中图分类号:TG146.2 **文献标识码**:A **文章编号**:1000-8365(2024)12-1117-08

Molecular Dynamics Simulation of the Nanoindentation of Carbon Nanotubes and Graphene-reinforced Aluminium Matrix Composites

SHU Qiaonan, JIA Zhendong, CAO Lin, LI Jinshan, CHEN Biao

(State Key Laboratory of Solidification Processing, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

Abstract: Carbon nanotubes (CNTs) and graphene (Gr), which represent one- and two-dimensional carbon nanomaterials, respectively, are two commonly used reinforcing materials in metal matrix composites (MMCs). In this study, molecular dynamics simulations of the nanoindentation behavior of CNT- and Gr-reinforced aluminium (Al) matrix composites (i.e., CNT/Al and Gr/Al) with the same structures were performed to study the compressive strengthening effect and indentation deformation behavior of CNTs and Gr on aluminium matrix composites. The simulation results show that the plastic deformation of Gr/Al during nanoindentation is significantly smaller than that of CNT/Al, whereas CNT/Al exhibits CNT dents when the indentation depth is larger. The hindering effect of Gr on dislocations is significantly better than that of CNTs, and the proportion of immovable dislocations in Gr/Al increases with increasing indentation depth, which can further improve the dislocation strengthening effect. As a result, the combined compressive properties and the ability to hinder large deformation of the matrix of Gr/Al are superior to those of CNT/Al.

Key words: carbon nanotubes; graphene; aluminium matrix composites; molecular dynamics simulations; nanoindentation

碳纳米管(carbon nanotube, CNT)和石墨烯(graphene, Gr)因其特殊的结构和优异的机械、光学及电学性能而受到广泛关注,被认为是未来的革命性材料[1-5]。Gr 是一种由碳原子以 sp^2 杂化轨道组成的六边形蜂窝晶格结构的二维纳米材料[6]。CNT 的基本结构与 Gr 相似,是由 Gr 围绕中心轴按一定螺旋角卷曲而成的一维纳米材料[3]。近年来,CNT 和 Gr 两种纳米碳材料作为增强材料被广泛应用于金属基复合材料(metal matrix composites, MMCs)的制备[7-9]。特别是在铝基复合材料(aluminium matrix composites,

收稿日期:2024-10-08

基金项目:国家自然科学基金(52071269, 52471163, U2067217);广西重点研发计划(AB23026138)

作者简介:舒巧囡,2000 年生,硕士生.研究方向为碳纳米管和石墨烯增强铝基复合材料的分子动力学模拟.
Email: shuqiaonan@mail.nwpu.edu.cn

通讯作者:陈 彪,1987 年生,博士,教授.研究方向为轻合金及其复合材料. Email: chen@nwpu.edu.cn; biao.chen521@gmail.com

引用格式:舒巧囡,贾振东,曹谦,李金山,陈彪.碳纳米管和石墨烯增强铝基复合材料纳米压痕分子动力学模拟[J].铸造技术,2024,45(12):1117-1124.

SHU Q N, JIA Z D, CAO L, LI J S, CHEN B. Molecular dynamics simulation of the nanoindentation of carbon nanotubes and graphene-reinforced aluminium matrix composites[J]. Foundry Technology, 2024, 45(12): 1117-1124.

中国知网 https://www.cnki.net

AMCs)中，与传统陶瓷颗粒相比，CNT 和 Gr 具有更优越的强化效果，可以在很大程度上提高材料的力学性能[10-11]。

大量实验和计算研究表明，CNT 和 Gr 都能显著改善 AMCs 的力学性能。然而由于实验制备技术和纳米表征技术的限制，碳纳米材料在金属基体中的增强机制还未被深刻理解。碳纳米材料的分布和制备方法等对复合材料力学性能有很大影响。想通过实验来研究还需要较长的时间，分子动力学(molecular dynamics, MD)模拟方法是研究复杂纳米材料系统最有效的方法之一[12-14]。近年来，有大量报道利用 MD 模拟方法研究 CNT 和 Gr 增强金属复合材料的力学性能。Silvestre 等[15]采用 MD 方法研究了 CNT/Al 的压缩性能，与纯 Al 相比，杨氏模量增加约 50%。而屈服应力和屈服应变都没有增加，这是由于 CNT 的局部屈曲导致碳纳米管–铝复合材料过早失效。Zhu 等[16]采用 MD 方法对纳米层状结构的 Gr/Al 进行了压缩实验，研究发现 Gr 会限制位错的滑移，导致界面上位错密度的增加。Lei 等[17]研究发现 Gr 涂层会使 Al 基体的承载面积增加约 5.36 倍，并改变了 Al 基体在纳米压痕过程中的变形行为。Peng 等[18]研究了具有 Gr 涂层的铜基体纳米压痕塑性变形，与纯铜相比，单、双和 3 层 Gr 涂层的临界载荷分别提高了 114%、204%和 344%。但是目前对于结构一致性的 CNT 和 Gr 对金属基复合材料性能影响的对比研究还未见报道。

本文采用分子动力学方法对纯铝、CNT/Al 和 Gr/Al 进行了相同条件下的纳米压痕模拟，得到了材料的载荷–压痕深度曲线，分析了 CNT 和 Gr 对铝基复合材料压痕性能的提升作用。通过剪切应变分布、原子位移矢量和压痕形貌 3 个方面，阐明了 CNT 和 Gr 对铝基复合材料纳米压痕塑性变形行为的影响，最后结合材料中的位错演化过程揭示了位错与 CNT 和 Gr 的相互作用。

1 模拟方法

在本研究中，采用 LAMMPS[19]软件进行纳米压痕模拟。原子模型由 ATOMSK[20]和 LAMMPS 软件共同构建，模型如图 1 所示。纯铝的纳米压痕模型如图 1a 所示，CNT/Al 和 Gr/Al 复合材料模型如图 1b 和 c 所示。Al 基体晶体取向为 x-[11$\bar{2}$]，y-[$\bar{1}$10]，z-[111]，基体整体尺寸为 158.7 Å×147.3 Å×150.3 Å，共包含 213 696 个原子。为了保证纳米压痕模拟过程中模型结构的稳定性，基体由 3 部分组成，分别是固定层、恒温层和牛顿层[21]。固定层和恒温层厚度分别为 7 和 10 Å。压头为金刚石压头，半径为 30 Å，距 Al 基体表面 15 Å。CNT 和 Gr 在 Al 基体内部同一高度位置处，距 Al 基体上表面 30 Å，图 1b 和 c 中的 CNT 和 Gr 结构分别如图 1d 和 e 所示。为了保证模型所用 CNT 和 Gr 具有可对比性，两者手性、方向及原子数均相同。

原子间相互作用势函数的准确性是决定分子动力学模拟结果准确性的重要因素之一。在本研究中，金属 Al 基体中 Al-Al 原子间势函数为EAM[22-23]，CNT

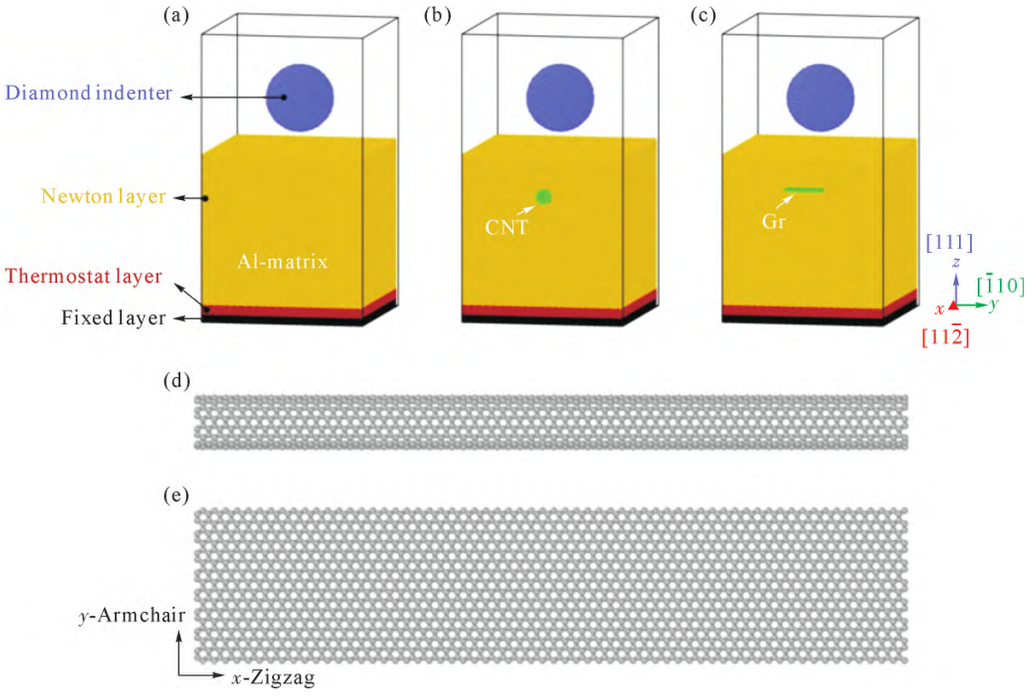


图 1 纳米压痕模拟原子模型：(a) Al; (b) CNT/Al; (c) Gr/Al; (d) CNT; (e) Gr

Fig.1 Atomic models used for nanoindentation simulations: (a) Al; (b) CNT/Al; (c) Gr/Al; (d) CNT; (e) Gr

中国知网 https://www.cnki.net

和 Gr 结构中的 C-C 原子间势函数为 AIREBO[24]，CNT 和 Gr 与 Al 基体之间的 Al-C 原子间势函数为 Morse[25]。金刚石压头与 Al 基体之间的 C-Al 原子间作用势函数为 LJ[26-27]。金刚石压头原子间相互作用力被忽略，这是由于金刚石比金属基体硬得多，这样处理可以节约计算资源。

在进行纳米压痕模拟时，体系参数设置如下：x 和 y 方向上为周期性边界条件，z 方向为固定边界条件。固定边界层原子，恒温层原子温度预设为 300 K，牛顿层速度不预设，控温方式为速度标定法，并不断进行温度修正。步长为 0.001 ps，系综为 NVE，弛豫时间为 500 ps。在实现纳米压痕过程时，压头下降速度为 0.1 Å/ps，压入最大深度为 30 Å，利用压头质心受力计算载荷，保载时间为 20 ps，随后压头上升回复至原位。模拟结果采用了 OVITO[28]软件实现可视化，利用原子应变[29]分析剪切应变，共近邻分析[30]识别原子晶体结构，以及位错提取算法[31]识别位错线和晶体缺陷。

2　实验结果及讨论

2.1　纳米压痕载荷–压痕深度曲线

纯 Al、CNT/Al 和 Gr/Al 复合材料纳米压痕模拟加载过程中载荷与压痕深度关系如图 2 所示。加载曲线分为 2 部分，第 1 部分为弹性变形阶段，根据赫兹弹性理论[32]，球面接触的弹性响应载荷 F 和压痕深度 h 的关系为：

$$F=\frac{3}{4}E^*R^{1/2}h^{3/2} \tag{1}$$

式中，E^* 为约化弹性模量；压头半径 R=3 nm。E^* 可以通过下式计算得到：

$$E^*=\frac{E_s}{1-\nu_s^2} \tag{2}$$

式中，E_s 为弹性模量；ν_s 为泊松比，纯铝的泊松比 ν_s=0.33。计算得到 Gr/Al、CNT/Al 和 Al 的弹性模量分别为 115.92、109.82 和 97.61 GPa，Gr/Al 和 CNT/Al 相比与纯 Al 分别提高了 18.76%和12.51%。

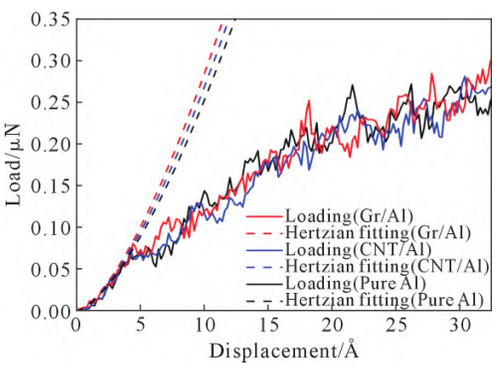


图 2　Al、CNT/Al 和 Gr/Al 复合材料的载荷–压痕深度曲线

Fig. 2　Load-indentation depth curves of the pure Al, CNT/Al and Gr/Al composites

随着压痕深度的增大，材料进入塑性变形阶段，通过载荷曲线可以看出材料的抗压能力。在压痕深度为 5.6~7.8 Å 时，Gr/Al 相比于 CNT/Al 和纯 Al 抗压强度有明显上升。随后 3 种材料的压痕载荷相差不大，通过计算塑性变形阶段的载荷平均值，Gr/Al、CNT/Al 和 Al 分别为 0.1876 、0.1795 和 0.186 4 μN。由此可见，Gr 对 Al 基体的抗压能力有提升作用，而 CNT 对 Al 基体的抗压能力反而有弱化作用。这主要是由于 Gr 的平面状结构能够在面内有效承载压力，使 Gr/Al 复合材料的纳米压痕强度提升；而 CNT 的中空管状结构在径向抗压能力较差，且在压头压入方向的垂直面上有效承载面积较小，故而导致 CNT/Al 复合材料的纳米压痕强度较低。

2.2　纳米压痕塑性变形行为

为了进一步分析 CNT 和 Gr 在铝基复合材料中的纳米压痕塑性变形行为，提取了纯 Al(图 3a1~a5)、CNT/Al(图 3b1~b5)和 Gr/Al(图 3c1~c5)在不同压痕深度时原子剪切应变的截面快照，如图 3 所示。在压痕深度为 5 Å 时(图 3a1~c1)，材料开始发生塑性变形，基体中出现滑移带，此时抗压强度会出现小幅下降。在纯铝中($\bar{1}11$)滑移面被激活，压头下发生塑性变形的原子呈倒梯状分布；在 CNT/Al 中同样是($\bar{1}11$) 滑移面被激活，但压头下塑性变形原子呈与(111)面平行向下扩展；在 Gr/Al 中塑性变形原子沿(111)面平行向下扩展过程中再次出现($\bar{1}11$)滑移面，最终在塑性变形区前端汇聚成尖凸状，增大了进一步塑性变形的难度，从而提高材料的整体抗压强度。随着压痕深度的增大，当 d=10 Å 时(图 3a2~c2)，可以明显观察到 3 种材料塑性变形扩展行为的差异。在纯铝中，塑性变形区以台阶状向下扩展，高应变原子所在位置即发生下一次变形处；在 CNT/Al 中，由于 CNT 的界面引导作用，导致滑移区并没有像纯铝以台阶状连续向下扩展，而且直接沿($\bar{1}11$)滑移面原子扩展至 CNT-Al 界面处，在 CNT 上方包围出一个倒梯形低塑性变形区。这种弧形界面的引导作用使得 CNT/Al 复合材料的抗压强度在此处发生较大下降，这也是图 2 中蓝色实线在 10 Å 处迅速下降的原因；在 Gr/Al 中，Gr 的平面状结构将塑性变形区引导至呈现出与 Gr 宽度一致的矩形区，Gr 的存在能够有效阻碍高塑性变形区向 Gr 下方基体的应变传递，从而提升 Gr/Al 复合材料的抗压强度。在压痕深度为 20 和 30 Å 时，纯 Al 仍然按照台阶式进行塑性变形区扩展；CNT 在压头的持续下降过程中被压

中国知网　https://www.cnki.net

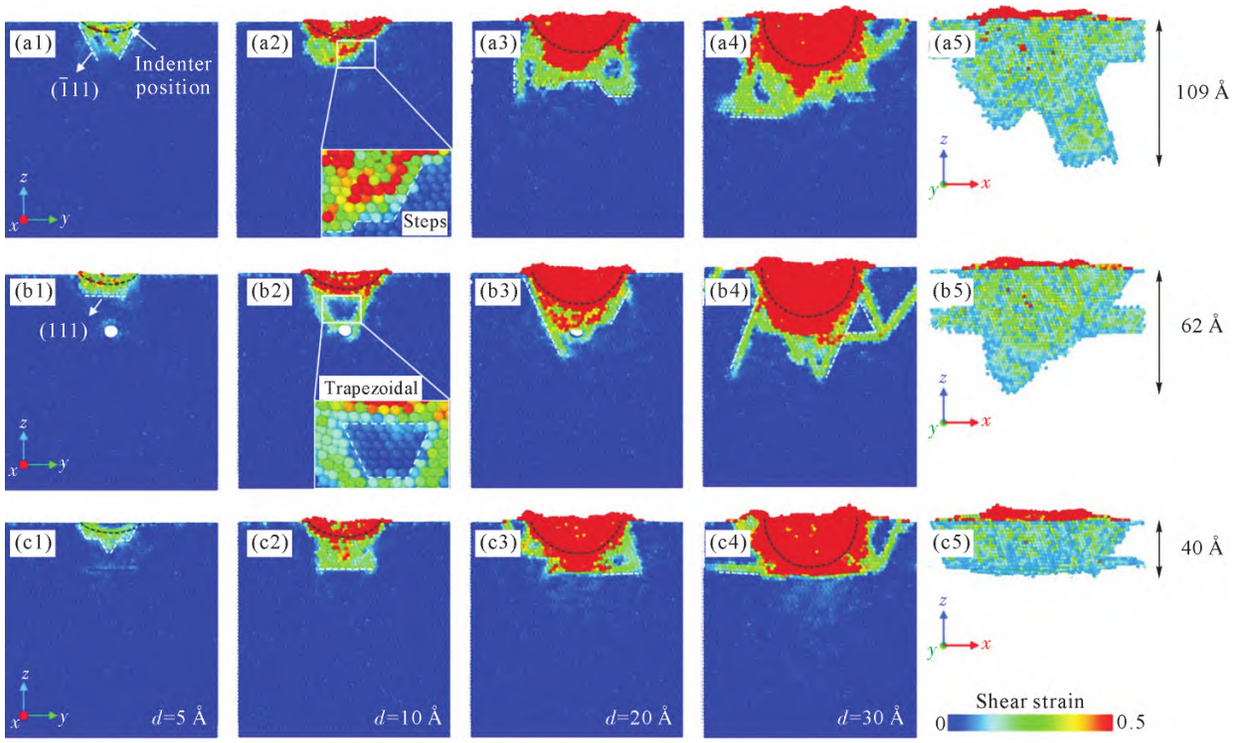


图 3 在 5、10、20 和 30 Å 压痕深度下原子剪切应变截面快照:(a1~a5) Al; (b1~b5) CNT/Al; (c1~c5) Gr/Al

Fig.3 Snapshots of atomic shear strain cross sections at indentation depths of 5, 10, 20 and 30 Å: (a1~a5) Al; (b1~b5) CNT/Al; (c1~c5) Gr/Al

扁,CNT/Al 基体中变形区沿(1̄11)滑移面进行多条滑移带的扩展;Gr 持续阻碍高应变向下传递,基体高塑性变形始终在 Gr 所在平面以上进行,原子大量向上运动并堆积在表面处。图 3(a5~c5)是提取了材料在压痕深度为 30 Å 时剪切应变值大于 0.1 的原子区域,通过对比 3 种材料的高应变区深度,纯 Al、CNT/Al 和 Gr/Al 分别为 109、62 和 40 Å,可以直观得看出 CNT 和 Gr 对阻碍压痕在金属基体中产生更大塑性变形的有益效果。

图 4 为纯铝、CNT/Al 和 Gr/Al 在不同压痕深度时原子位移矢量的截面快照,图中箭头所指方向为原子位移矢量方向。3 种材料在压痕作用力下,原子运动方向的规律表现出明显的差异。在压痕深度为 10 Å 时,纯铝(图 4a1)的原子位移矢量方向整体为沿 *Z* 轴负方向,原子位移矢量大小以压头与基体接触点为中心呈放射状渐变分布;CNT/Al 复合材料(图 4b1)由于 CNT 的存在使上方基体原子的运动方向汇聚于 CNT 的上表面,原子位移矢量方向呈锥形分布,与图 3b2 中的高剪切应变分布一致。这种 CNT 的引导作用会使 CNT 的上表面受较大应力分布,导致 CNT 上表面的凹陷;Gr/Al 复合材料 (图 4c1)由于 Gr 的存在,使得上表面基体原子均以垂直向下方向进行原子运动,Gr 表面的载荷分布均匀,且片状结构承载力高,能够进一步阻碍原子位移的向下传递。随着压痕深度进一步增大到 20 Å 时,纯铝(图 4a2)的原子位移矢量方向以被激活滑移系方向为主导,整体仍呈放射状分布;CNT/Al 复合材料(图 4b)的原子位移矢量方向一旦突破 CNT 上表面的承载,就和纯铝的位移矢量方向一致,呈放射状并以滑移系方向为主导;Gr/Al 复合材料(图 4c2)由于 Gr 的阻碍作用更强,原子位移无法通过 Gr 界面进行有效传递,因此出现原子被向上反推现象。当压痕深度到 30 Å 时,材料中都出现原子被反推向上运动,纯铝以多个滑移系方向为主要运动方向进行扩展(图 4a3),CNT/Al 复合材料则以 CNT 下部垂直方向为主要运动方向进行扩展(图 4b3),Gr/Al 复合材料中 Gr 的阻碍作用阻止了大部分原子的向下运动,主要承力点仍在 Gr 上,大部分基体原子被反推向上进行扩展(图 4b3)。

图 5a 和 c 展示了压痕深度为 30 Å 时 CNT 和 Gr 的俯视和正视原子形貌以及原子剪切应变。CNT 在受压痕载荷时中间段发生凹陷,而 Gr 仍然保持平面状,没有由于压痕载荷产生大变形。同时,观察 CNT 和 Gr 的原子剪切应变分布,以 Gr 受压中心点沿 *x* 方向两侧分布的剪切应变值最高,说明 Gr 在受压时中心线两侧原子提供了较大的支撑力,避免了 Gr 产生较大的中心凹陷;而 CNT 中能起到支撑的原子数少,导致 CNT 产生了较大的中心凹陷。值得强调的是,原始模型中 CNT 在 *z* 方向上的最高点和Gr 相同,都是距离基体表面 30 Å。当压痕深度为

中国知网 https://www.cnki.net

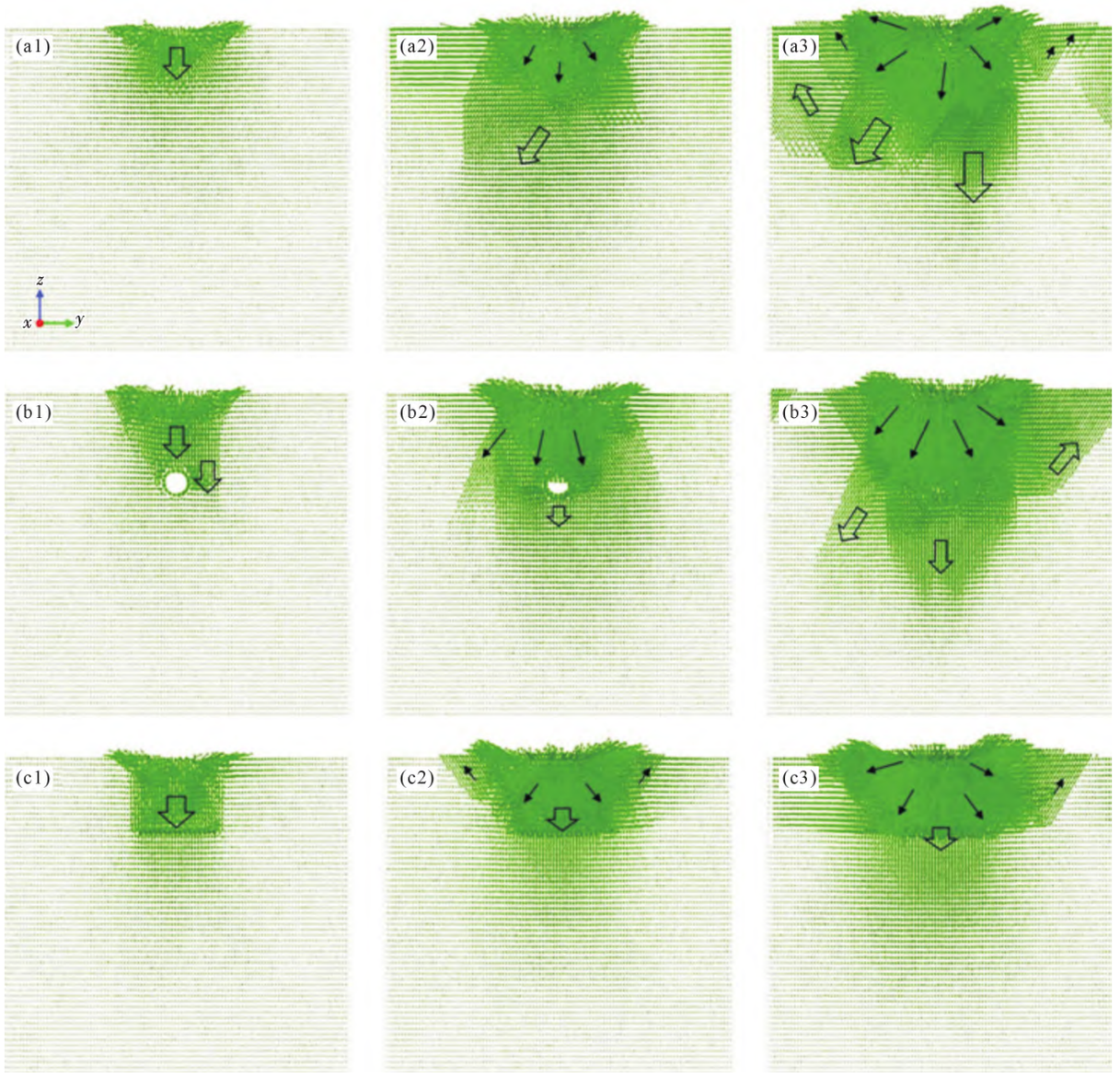


图 4　在 10、20 和 30 Å 压痕深度下原子位移矢量截面快照:(a1~a3) Al; (b1~b3) CNT/Al; (c1~c3) Gr/Al

Fig.4　Snapshot of atomic displacement vector cross sections at 10, 20 and 30 Å indentation depths: (a1~a3) Al; (b1~b3) CNT/Al; (c1~c3) Gr/Al

30 Å 时,将模型垂直于 x 方向进行截面观察,可以发现在 CNT/Al 复合材料模型(图 5b)中压头底部距离被压的 CNT 顶部 10 Å，而 Gr/Al 复合材料模型(图 5d)中压头底部距离被压的 Gr 顶部 3 Å。图 5b 和 d 中蓝色实线框出的是压痕深度为 30 Å 时,CNT/Al 和 Gr/Al 基体受压向上运动后形成的表面堆积原子。CNT/Al 的表面堆积原子数和堆积高度均小于 Gr/Al，受压变形的 CNT 为基体原子的移动提供了空间,降低了原子运动所需能量,导致材料抗压性能下降。

通过统计 CNT 中间段压缩量与压痕深度曲线,如图 6 所示,CNT 凹陷过程可以分为 4 个阶段,分别是平稳阶段、缓慢波动上升阶段、线性快速上升阶段和稳定阶段。当压痕深度小于 6 Å 时,CNT 的压缩量变化较小,属于正常原子运动范围,还未发生凹陷现象。当压痕深度为 6~16 Å 时,此时压缩量开始缓慢波动增大,CNT 出现被压缩现象,CNT 表面发生一定程度的弯曲。当压痕深度为 16~24 Å 时,CNT 的压缩量与压痕深度呈线性关系并快速增加,CNT 发生较大压缩变形,几乎失去变形抗力。直到压痕深度大于 24 Å 时,CNT 中段完全被压扁,此时 CNT 中间段压缩量不再变化，进一步变形以 CNT 中间段向两侧传递方式进行。

2.3　纳米压痕位错演化行为

为了进一步研究材料在纳米压痕过程中的滑移行为及位错与 CNT 和 Gr 的相互作用，利用共近邻原子分析(common neighbor analysis, CNA)和位错分析(dislocation analysis, DXA)获得不同压痕深度下材料的位错与缺陷结构信息,如图 7 所示。首先,在压痕深度为 5 Å 时,材料开始发生塑性变形,纯 Al

中国知网　https://www.cnki.net

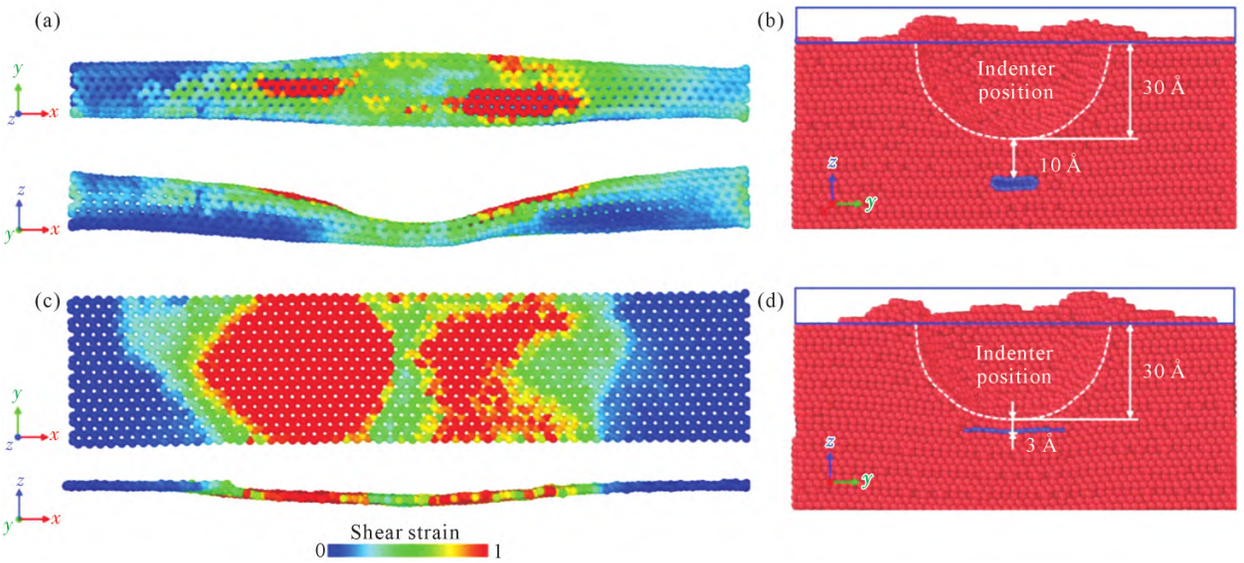


图 5 压痕深度为 30 Å 时原子形貌和剪切应变:(a) CNT 的俯视与正视原子形貌及剪切应变;(b) CNT/Al 的原子截面形貌;(c) Gr 的俯视与正视原子形貌及剪切应变;(d) Gr/Al 的原子截面形貌

Fig.5 Atomic morphology and atomic shear strain at an indentation depth of 30 Å: (a) top-view and front-view atomic morphology and shear strain of CNT; (b) atomic cross-sectional morphology of CNT/Al; (c) top-view and front-view atomic morphology and shear strain of Gr; (d) atomic cross-sectional morphology of Gr/Al

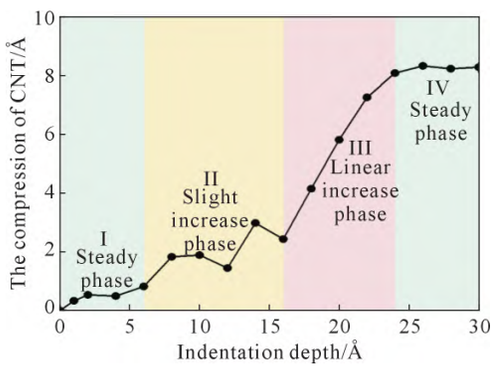


图 6 CNT 中间段压缩量与压痕深度曲线

Fig.6 Compression amount of the middle part of the CNT- indentation depth curve

(图 7a1)中的位错以棱柱位错环形核,所激活的滑移面数量较多;CNT/Al(图 7b1)中的位错以单位错线被激活,滑移面为较难激活的(111)面;Gr/Al(图 7c1)中的位错同样以单位错线被激活,滑移面与纯铝中类似,没有出现(111)滑移面。当压痕深度为10 Å 时,纯 Al(图 7a2)中不仅在压头正下方出现了位错,同时在未被压头压入的位置也出现了位错环。这表明纯铝在受压痕载荷作用时,基体内部的塑性变形传播速度更快,传播范围更广;CNT/Al(图 7b2)中由于 CNT 的阻碍作用,位错从压头 -Al 界面连接到 CNT-Al 界面,形成压头下方的刃型位错;Gr/Al(图 7c2)中,同样由于 Gr 的阻碍作用,位错主要分布在两个界面之间,此时 CNT 和 Gr 与位错相互作用的差异性还未体现;随着压痕深度增大到 20 Å 时,纯 Al(图 7a3)中已出现大量缠结的位错环,位错滑移难度低,滑移距离大,基体内部发生较大塑性变形;CNT/Al(图 7b2)中由于 CNT 的管状结构上表面呈弧形,且承载面积较小,对位错的阻碍作用有限,当位错突破 CNT 的阻碍后,出现与纯 Al 中相似的位错环并向下滑移;Gr/Al(图 7c3)中 Gr 对于位错的阻碍作用显著高于 CNT,且形成的位错中肖克莱位错数量较少,全位错和梯杆位错数量提升,不可动位错比例的提高能够进一步提高材料的压痕抗力。除此之外,Gr/Al 中的位错分布也较为集中,大多位于压头底部,既无法向下滑移,也不向周围扩展;当压痕深度到 30 Å 时,纯 Al(图 7a4)中已经出现脱落的位错环,压头正下方位错较少,沿滑移系方向大量滑动;CNT/Al(图 7b4)中虽然在 CNT 下方出现位错环,并有向下滑动趋势,但由于 CNT 下界面的存在,对位错的钉扎作用明显,未出现脱落的位错环;Gr/Al(图 7c4)中的位错分布情况与压痕深度在 20 Å 时类似,位错并没有随着压痕深度的增加而突破 Gr 的阻碍。

3 结论

(1)载荷–压痕深度曲线中塑性变形段 Gr/Al、CNT/Al 和 Al 的平均载荷值分别为0.187 6、0.179 5 和 0.186 4 μN。Gr 对 Al 基体的抗压能力有提升作用,而 CNT 对 Al 基体的抗压能力反而有弱化作用。

(2)压痕过程中 Gr/Al 复合材料的塑性变形区域被限制在 Gr 以上部分,变形区明显小于 CNT/Al 和纯 Al,且表面原子堆积数要明显高于 CNT/Al,具有更高的抗压强度和较低的塑性变形能力。CNT 在压痕深度大于 16 Å 后发生较大压缩量变形,这一过程

中国知网 https://www.cnki.net

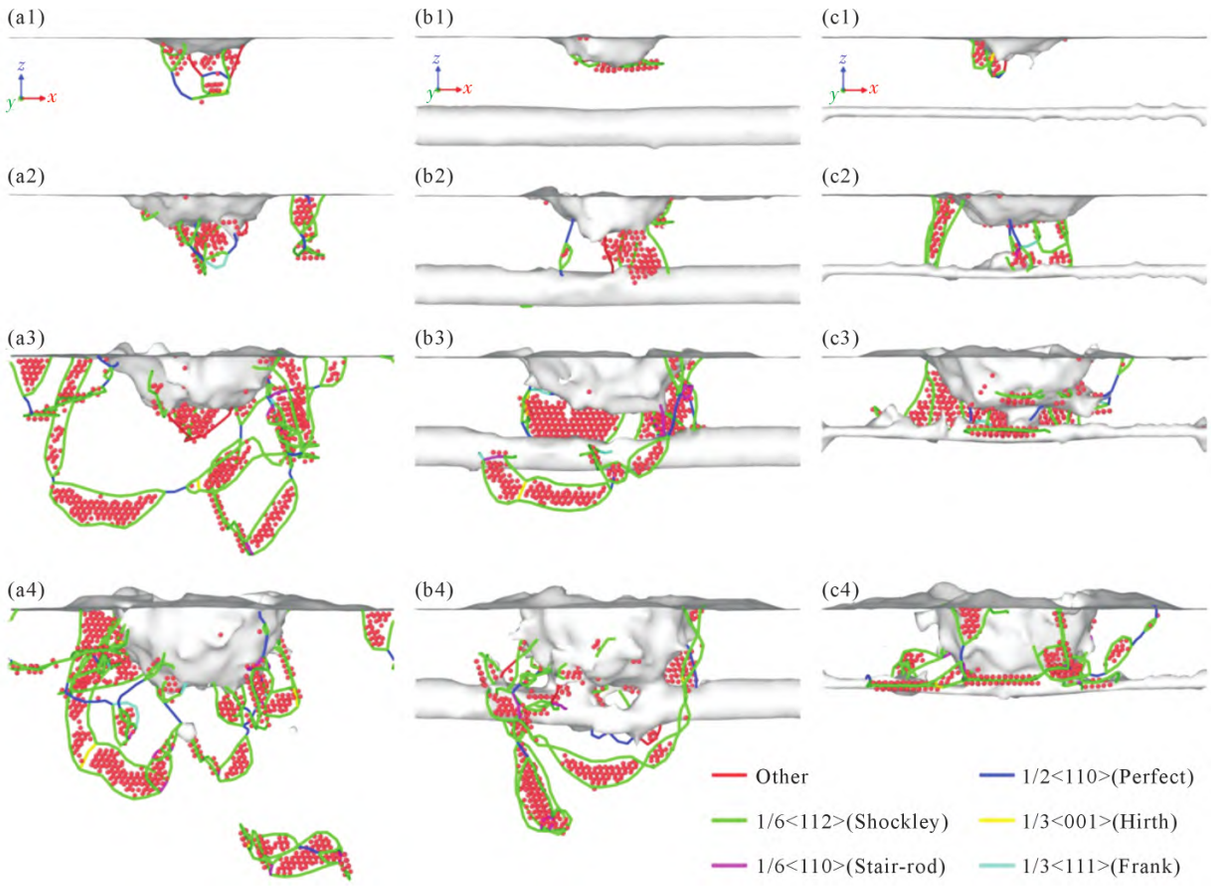


图 7　在 5、10、20 和 30 Å 压痕深度下位错及缺陷结构代表性快照:(a1~a4) Al; (b1~b4) CNT/Al; (c1~c4) Gr/Al(原子根据计算的 CNA 着色,图中只显示了 HCP 原子,其他原子未显示)

Fig.7　Representative snapshots of dislocations and defect structures at indentation depths of 5, 10, 20 and 30 Å: (a1~a4) Al; (b1~b4) CNT/Al; (c1~c4) Gr/Al (atoms are colored according to the calculated CNA, only HCP atoms are shown in the figure; other atoms are not shown)

是导致材料抗压能力较弱的主要原因。

(3)CNT 对位错的阻碍作用有限,位错一旦越过 CNT 基体中会出现与纯 Al 基体中类似的位错环,但由于 CNT-Al 下界面的存在,对位错还有一定的钉扎作用,使得位错脱落的难度增大;Gr 对位错的阻碍作用明显优于 CNT,位错被阻挡在 Gr 以上部分难以滑过,且 Gr/Al 中的不可动位错比例随压痕深入不断增大,能够进一步提升位错强化作用。

参考文献:

[1] GEIM A K, NOVOSELOV K S. The rise of graphene[J]. Nature Materials, 2007, 6: 183-191.

[2] PARK S, RUOFF R S. Chemical methods for the production of graphenes[J]. Nature Nanotechnology, 2009, 4: 217-224.

[3] IIJIMA S. Helical microtubules of graphitic carbon[J]. Nature, 1991, 354: 56-58.

[4] ESAWI A M K, FARAG M M. Carbon nanotube reinforced composites: Potential and current challenges[J]. Materials & Design, 2007, 28(9): 2394-2401.

[5] POPOV V N. Carbon nanotubes: Properties and application[J]. Materials Science and Engineering: R: Reports, 2004, 43(3): 61-102.

[6] YAZYEV O V, CHEN Y P. Polycrystalline graphene and other two-dimensional materials[J]. Nature Nanotechnology, 2014, 9: 755-767.

[7] CHEN B, SHEN J, YE X, JIA L, LI S, UMEDA J, TAKAHASHI M, KONDOH K. Length effect of carbon nanotubes on the strengthening mechanisms in metal matrix composites[J]. Acta Materialia, 2017, 140: 317-325.

[8] CHEN B, KONDOH K, LI J S, QIAN M. Extraordinary reinforcing effect of carbon nanotubes in aluminium matrix composites assisted by in-situ alumina nanoparticles[J]. Composites Part B: Engineering, 2020, 183: 107691.

[9] ZHANG X, ZHAO N Q, HE C N. The superior mechanical and physical properties of nanocarbon reinforced bulk composites achieved by architecture design - A review[J]. Progress in Materials Science, 2020, 113: 100672.

[10] KINLOCH I A, SUHR J, LOU J, YOUNG R J, AJAYAN P M. Composites with carbon nanotubes and graphene: An outlook[J]. Science, 2018, 362(6414): 547-553.

[11] ZHAO Z Y, BAI P K, DU W B, LIU B, PAN D, DAS R, LIU C T, GUO Z H. An overview of graphene and its derivatives reinforced metal matrix composites: Preparation, properties and applications[J]. Carbon, 2020, 170: 302-326.

[12] YOO S C, LEE D J, RYU S W, KANG B, RYU H J, HONG S H. Recent progress in low-dimensional nanomaterials filled multifunctional metal matrix nanocomposites[J]. Progress in Materials

中国知网　https://www.cnki.net

Science, 2023, 132: 101034.

[13] YANG Y J, LIU M B, DU J X, ZHANG W, ZHOU S Q, REN W J, ZHOU Q H, SHI L. Construction of graphene network in Ni matrix composites: A molecular dynamics study of densification process [J]. Carbon, 2022, 191: 55-66.

[14] CHEN S, AITKEN Z H, PATTAMATTA S, WU Z X, YU Z G, SROLOVITZ D J, LIAW P K, ZHANG Y W. Simultaneously enhancing the ultimate strength and ductility of high-entropy alloys via short-range ordering[J]. Nature Communications, 2021, 12: 4953.

[15] SILVESTRE N, FARIA B, CANONGIA LOPES J N. Compressive behavior of CNT-reinforced aluminum composites using molecular dynamics [J]. Composites Science and Technology, 2014, 90: 16-24.

[16] ZHU J Q, LIU X, YANG Q S. Dislocation-blocking mechanism for the strengthening and toughening of laminated graphene/Al composites[J]. Computational Materials Science, 2019, 160: 72-81.

[17] LEI Y X, YAN Y P, LYU J J. Atomistic study of the strengthening mechanisms of graphene coated aluminum [J]. Nanotechnology, 2020, 31(5): 055708.

[18] PENG W X, SUN K, ZHANG M, SHI J Q, CHEN J. Effects of graphene coating on the plastic deformation of single crystal copper nanocuboid under different nanoindentation modes[J]. Materials Chemistry and Physics, 2019, 225: 1-7.

[19] 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. LAMMPS - a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales [J]. Computer Physics Communications, 2022, 271: 108171.

[20] HIREL P. Atomsk: A tool for manipulating and converting atomic data files[J]. Computer Physics Communications, 2015, 197: 212-219.

[21] HUA D P, XIA Q S, WANG W, ZHOU Q, LI S, QIAN D, SHI J Q, WANG H. Atomistic insights into the deformation mechanism of a CoCrNi medium entropy alloy under nanoindentation[J]. International Journal of Plasticity, 2021, 142: 102997.

[22] LIU C L, PLIMPTON S J. Molecular dynamics simulations of grain boundary diffusion in Al using embedded atom method potentials[J]. Journal of Materials Research, 1995, 10: 1589-1592.

[23] MISHIN Y, FARKAS D, MEHL M J, PAPACONSTANTOPOULOS D A. Interatomic potentials for monoatomic metals from experimental data and ab initio calculations[J]. Physical Review B, 1999, 59(5): 3393-3407.

[24] STUART S J, TUTEIN A B, HARRISON J A. A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions[J]. The Journal of Chemical Physics, 2000, 112(14): 6472-6486.

[25] DANDEKAR C R, SHIN Y C. Molecular dynamics based cohesive zone law for describing Al-SiC interface mechanics[J]. Composites Part A: Applied Science and Manufacturing, 2011, 42(4): 355-363.

[26] PIĄTEK A, NOWAK R, GBURSKI Z. A titanium-decorated fullerene cluster - a molecular dynamics simulation[J]. Solid State Phenomena, 2008, 140: 109-116.

[27] HALICIOĞLU T, POUND G M. Calculation of potential energy parameters form crystalline state properties[J]. Physica Status Solidi (a), 1975, 30(2): 619-623.

[28] STUKOWSKI A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO - the open visualization tool[J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2010, 18(1): 015012.

[29] SHIMIZU F, OGATA S, LI J. Theory of shear banding in metallic glasses and molecular dynamics calculations[J]. Materials Transactions, 2007, 48(11): 2923-2927.

[30] HONEYCUTT J D, ANDERSEN H C. Molecular dynamics study of melting and freezing of small Lennard-Jones clusters[J]. The Journal of Physical Chemistry, 1987, 91(19): 4950-4963.

[31] STUKOWSKI A, BULATOV V V, ARSENLIS A. Automated identification and indexing of dislocations in crystal interfaces [J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2012, 20(8): 085007.

[32] HEINRICH H. Ueber die Berührung fester elastischer körper[M]. CRELLE A L, BORCHARDT C W, et al. Band 92. Berlin: De Gruyter, 1882: 156-171.

中国知网 https://www.cnki.net