

# 石墨烯力学性能研究进展\*

韩同伟<sup>1</sup> 贺鹏飞<sup>2,†</sup> 骆英<sup>1</sup> 张小燕<sup>3</sup>

<sup>1</sup> 江苏大学土木工程与力学学院, 江苏镇江 212013

<sup>2</sup> 同济大学航空航天与力学学院, 上海 200092

<sup>3</sup> 江苏大学化学化工学院, 江苏镇江 212013

**摘 要** 石墨烯是近年来发现的由单层碳原子通过共价键结合而成的具有规则六方对称的理想二维晶体, 是继富勒烯和碳纳米管之后的又一种新型低维碳材料. 由于具有非凡的电学、热学和力学性能以及广阔的应用前景, 石墨烯被认为是具有战略意义的新材料, 近年来迅速成为材料科学和凝聚态物理等领域最为活跃的研究前沿. 本文简要介绍了研究石墨烯力学性能的实验测试、数值模拟和理论分析方法, 重点综述了石墨烯力学性能的最新研究进展, 主要包括二维石墨烯的不平整性和稳定性, 石墨烯的杨氏模量、强度等基本力学性能参数的预测, 石墨烯力学性能的温度相关性和应变率相关性、原子尺度缺陷和掺杂等对力学性能的影响以及石墨烯在纳米增强复合材料和微纳电子器件等领域的应用, 最后对石墨烯材料与结构的力学研究进行了展望.

**关键词** 石墨烯, 力学性能, 分子动力学, 缺陷

## 1 引言

石墨烯 (graphene), 又称为二维石墨片, 是由单层碳原子通过共价键 (碳  $sp^2$  杂化轨道所形成的  $\sigma$  键、 $\pi$  键) 结合而成的具有规则六方对称的理想二维晶体<sup>[1-2]</sup>, 如图 1 所示, 于 2004 年由英国曼彻斯特大学的安德烈·盖姆 (Andre Geim) 和康斯

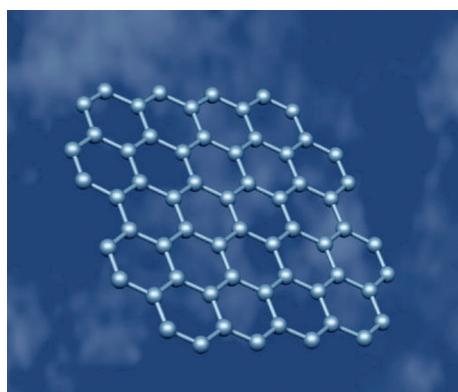


图 1 石墨烯的结构示意图<sup>[2]</sup>

现<sup>[1]</sup>, 是继富勒烯 ( $C_{60}$ ) 和碳纳米管 (CNTs) 之后的又一种新型低维碳材料, 其厚度仅为头发丝直径的 20 万分之一, 约为 0.335 nm, 是目前发现的最薄的层状材料.

在石墨烯中, 每个碳原子通过很强的  $\sigma$  键 (自然界中最强的化学键) 与其他 3 个碳原子相连接, 这些很强的碳-碳键致使石墨烯片层具有极其优异的力学性质和结构刚性. 碳原子有 4 个价电子, 每个碳原子都贡献一个未成键的  $\pi$  电子, 这些  $\pi$  电子与平面成垂直的方向可形成  $\pi$  轨道,  $\pi$  电子可在晶体中自由移动, 赋予石墨烯良好的导电性. 但这些面外离位的  $\pi$  键与相邻层内的  $\pi$  键的层间相互作用远远小于一个  $\sigma$  键, 即片层间的作用力较弱, 因此石墨层间很容易互相剥离, 形成薄的石墨片. 石墨烯的碳基二维晶体是形成  $sp^2$  杂化碳质材料的基元, 它可以包裹起来形成零维的富勒烯 (fullerene,  $C_{60}$ ), 卷起来形成一维的纳米碳管 (carbon nanotube, CNT), 层层堆积形成三维的石墨 (graphite), 石墨烯是构建众多碳质材料的基本结构单元<sup>[3]</sup>, 如图 2 所示.

坦丁·诺沃肖罗夫 (Konstantin Novoselov) 首先发

收稿日期: 2011-01-06, 修回日期: 2011-03-17

\* 江苏大学高级人才科研启动基金 (10JDG034) 和上海市科委基础研究重点项目 (09JC1414400) 资助

† E-mail: ph232@tongji.edu.cn

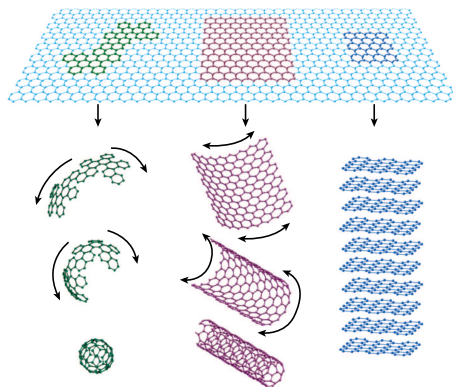


图2 石墨烯及其构建的零维富勒烯、一维碳纳米管和三维石墨<sup>[3]</sup>

由于独特的二维结构以及优异的晶体品质,石墨烯具有十分优异的电学、热学、磁学和力学性能<sup>[1-8]</sup>,有望在高性能纳米电子器件、复合材料、场发射材料、气体传感器、能量存储等领域获得广泛应用.石墨烯是零隙半导体,具有一般低维碳材料所无法比拟的载流子特性,是其备受关注的重要原因之一.石墨烯成为凝聚态物理学中独一无二的描述无质量狄拉克-费米子(massless Dirac Fermions)的模型体系,这种现象导致了許多新奇的电学性质.因此,石墨烯为相对论量子电动力学现象的研究提供了重要借鉴.研究还表明,石墨烯的热导率和机械强度( $5\text{ kW}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ 和 $1.06\text{ TPa}$ )可与宏观石墨材料相媲美,断裂强度与碳纳米管相当<sup>[7-9]</sup>.此外,石墨烯为制备集超高导电、导热及机械性能等各种优越性能于一体的新型功能复合材料提供了一种理想的纳米填料<sup>[10-11]</sup>.因此,石墨烯被誉为新一代战略材料,近年来迅速成为材料科学和凝聚态物理领域最为活跃的研究前沿<sup>[2,12-15]</sup>.2009年12月,*Science*杂志将“石墨烯研究取得新进展”列为2009年十大科技进展之一.2010年10月,英国曼彻斯特大学的两位科学家安德烈·盖姆和康斯坦丁·诺沃肖罗夫因在二维空间材料石墨烯方面的开创性实验而获得诺贝尔物理学奖,由此引发石墨烯新的研究热潮.

本文主要介绍石墨烯在力学性能方面的最新研究进展,首先简要介绍研究石墨烯力学性能的实验测试、数值模拟和理论分析方法,然后重点综述石墨烯力学性能的最新研究进展,主要包括:(1)二维石墨烯的不平整性和稳定性;(2)石墨烯的杨氏模量、强度等基本力学性能参数的预测;(3)石墨烯力学性能的温度相关性和应变率相关性;(4)

原子尺度缺陷和掺杂等对石墨烯力学性能的影响;(5)石墨烯在纳米增强复合材料和微纳电子器件等领域的应用.在此基础上,指出今后值得重视的若干研究方向.

## 2 研究石墨烯力学性能的方法

纳米材料的力学行为是固体力学领域的重要科学问题,发展适用于低维纳米材料力学性能的预测及测试技术是当前固体力学研究领域的重要前沿课题.目前,对于石墨烯等原子厚度纳米薄膜,人们面临着从研究方法到研究内容等诸多方面的挑战与困难.研究石墨烯的力学性能,就研究方法而言,主要有实验测试、数值模拟和理论分析3种途径.

关于实验测试方法,文献[16-18]对纳米材料力学性能、纳米薄膜等界面强度测试方法进行了总结评述.然而,由于石墨烯独特的二维结构,就现阶段的实验条件而言,对石墨烯进行力学测试的难度仍然很大,主要原因一方面是高质量石墨烯材料的制备较为困难,另外,可有效使用的实验设备甚少,以及载荷与变形量的测量精度不易保证.目前只有原子力显微镜(AFM)纳米压痕实验系统可以有效使用,但仍须借助理论分析才能得到有效的材料力学性能参数.但是,纳米压痕的结果具有一定的分散性,压头尺寸、形状、位置以及材料本身的一些形貌特征对实验结果会带来较大的影响,需要进行大量试验,采用多点测试,统计分析的方法才能获得有意义的实验结果.

除了实验测试手段,数值模拟已经成为纳米材料力学行为研究的强有力工具<sup>[19-20]</sup>,文献[21]对此进行了详细的综述.一般而言,研究纳米尺度材料力学性能最常用的数值模拟计算方法有:量子力学方法<sup>[22]</sup>、分子力学(molecular mechanics)方法<sup>[23]</sup>、蒙特卡罗(Monte Carlo)方法<sup>[24-26]</sup>和分子动力学(molecular dynamics)方法<sup>[27-29]</sup>.从根本上讲,对材料的研究可以通过量子力学第一原理得到所需要的结果,但由于理论上的困难和计算机资源方面的限制,量子力学要处理成千上万个原子的分子体系,就显得无能为力.分子力学方法借助普遍适用的分子力场,建立各原子间微观变形运动与势能变化之间的关系,可以描述基态原子的结构变化特征<sup>[23]</sup>.但是,严格地讲,该方法描述的是绝对零度的分子体系,无法反映分子结构形变运动中的各种温度效应.特别对于所有原子皆

为表面原子的石墨烯结构, 温度变化对其物性的影响非常显著. 蒙特卡罗方法虽然通过波耳兹曼 (Boltzmann) 因子的引入能够描述不同温度的平均体系, 可仍然只用势能项描述分子体系, 不含有动能项, 因而不能真实体现分子体系的动态变化过程. 分子动力学方法具有其他方法所没有的特点, 既含有动能项, 也包含分子结构变化的时间函数, 从而可以定量地模拟真实固体中所发生的动态过程, 深入了解原子运动的复杂机制, 从本质上揭示结构运动规律. 当研究较短时间尺度内具有温度效应与时间效应的结晶过程、膨胀过程、弛豫过程和外力场中的形变过程时, 分子动力学方法具有不可替代的优势. 目前, 分子动力学模拟可以实现百万甚至数十亿个原子的计算规模, 已经成为研究纳米材料力学行为的有力工具.

在理论分析方面, 由于目前纳米尺度力学的理论框架尚未成熟, 基于连续介质理论的分析方法被尝试用来研究石墨烯、碳纳米管等微纳结构的力学行为<sup>[30-54]</sup>. 连续介质力学是一门相对完善的学科, 利用纳米结构与宏观结构的某些相似性, 采用连续介质力学理论进行唯象模拟, 可以克服分子动力学方法对时间和空间尺度的限制, 是一种非常有效的分析手段. 基于连续介质理论的分析方法大概有两类: 一类是采用等效模型, 如弹性梁模型、弹性壳模型等, 该方法是将石墨烯或碳纳米管结构用弹簧、杆、梁、薄膜、板、壳等元件来构造, 元件的力学与几何参数通过在少数几个典型变形情况下由原子模拟得到的相应结果来进行拟合, 但这种方法不能保证在选择典型变形情况以外其他更多情况下模拟的准确性, 而且只能进行线性分析; 另外一类方法是基于原子势的连续介质方法, 该方法通过 Born 律将原子的键能等效于连续介质固体的应变能, 把原子势计入连续介质本构模型之中, 如 Hwang 研究组<sup>[44-47, 49-54]</sup>提出的基于原子势的连续膜理论和后来发展的连续壳体理论. 当然, 由于纳米尺度所独有的一些特

殊性质, 在某些情况下, 我们无法直接利用现有的连续介质力学的基本理论, 因此仍需进一步完善和发展连续介质力学的理论和方法, 使其能够用于石墨烯、碳纳米管等力学问题的研究.

### 3 石墨烯的力学性能

#### 3.1 石墨烯的不平整性和稳定性

关于准二维晶体的存在, 科学界一直存在争议. 早在 1934 年, Peierls<sup>[55]</sup> 就提出准二维晶体材料在室温环境下会迅速分解或拆解. 根据 Mermin-Wagner 理论<sup>[56-57]</sup>, 长的波长起伏会使长程有序的二维晶体受到破坏. 另外, 根据弹性理论<sup>[58-59]</sup>, 二维薄膜在有限温度 ( $> 0$  K) 下表现出不稳定性, 尤其会发生弯曲现象. 因此科学家们一直认为严格的二维晶体结构由于热力学不稳定性而难以独立稳定地存在. 单层石墨烯的成功制备<sup>[1, 60]</sup> 震惊了物理界, 使科学家们对“完美二维晶体结构无法在非绝对零度下稳定存在”这一基本论述提出了质疑. Novoselov 等<sup>[1, 60]</sup> 利用机械剥离法 (mechanical cleavage) 首次成功获得了真正意义上的二维石墨烯片, 而且可在外界环境中稳定地存在, 为二维体系的实验研究提供了广阔的空间.

然而, 石墨烯在自然状态下是否为完美的平面结构还亟待进一步证实, 诸多学者对此进行了研究. Meyer<sup>[61-62]</sup> 和 Ishigami 等<sup>[63]</sup> 将石墨烯嵌入三维空间 (附着在微型支架或置于  $\text{SiO}_2$  衬底上), 通过透射电子显微镜观察并辅以数值模拟, 研究表明, 石墨烯并不完全平整, 产生了面外起伏褶皱, 如图 3(a) 所示. Fasolino 等<sup>[64]</sup> 采用蒙特卡罗模拟方法研究了石墨烯的平整度问题, 发现由于热涨落, 石墨烯中自发地存在大约 8 nm 的波纹状褶皱, 如图 3(b) 所示. 产生这些褶皱的原因可能与碳原子在二维石墨烯中所处的环境有一定的关系, Carlsson<sup>[65]</sup> 对此进行了讨论. 石墨烯中的碳原子在薄膜上下没有近邻原子, 碳原子容易在法向方向失

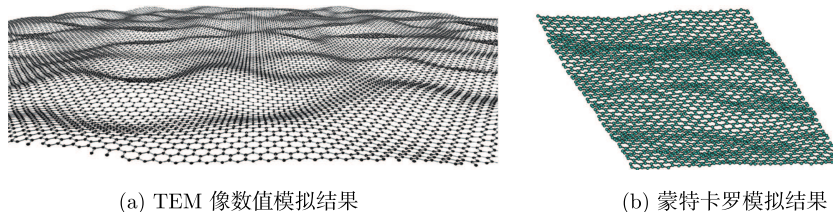


图 3 石墨烯中的存在的褶皱现象<sup>[61-64]</sup>

稳而没有恢复力.正是这些纳米级别的三维褶皱巧妙地使二维石墨烯晶体结构稳定地存在.褶皱的产生与碳碳键的柔性也存在有一定的关系.理论上,碳碳键长为 0.142 nm,实际自由状态下,石墨烯薄膜中的碳碳键长介于 0.130~0.154 nm 分布<sup>[64]</sup>.

另外,石墨烯的边界表现出不稳定性,边界的结构和形貌对石墨烯的性质会产生重要影响. Shenoy 等<sup>[66]</sup>基于有限元分析和原子模拟,研究发现,扶手椅型和锯齿型石墨烯的边界均会产生压应力,边界压力的存在会导致石墨烯薄膜边界产生翘曲现象,如图 4 所示,同时发现锯齿边的起伏幅度大于扶手椅边的起伏幅度. Reddy 等<sup>[67]</sup>通过

能量最小化研究石墨烯平衡态的构型发现,初始为矩形的 4 条边在平衡态时也会发生弯曲现象. 韩同伟等<sup>[68-69]</sup>基于 AIREBO 势函数利用分子动力学方法模拟了自由态石墨烯的弛豫性能,也发现边界会产生相似的翘曲现象,同时发现多层石墨烯的边界翘曲程度明显比单层石墨烯的小. Gass 等<sup>[70]</sup>采用扫描透射电镜对无支撑石墨烯的原子晶格进行了实验观测并辅以数值分析,研究表明,无支撑石墨烯的边界会重组产生卷曲现象,形成直径最小的纳米管. 石墨烯边界产生翘曲或卷曲的原因可能在于孤立的石墨烯边缘存在大量的悬键,由于悬键的存在,使得石墨烯边缘处的能量较高,从而致使其发生变形以减小边界处的能量.

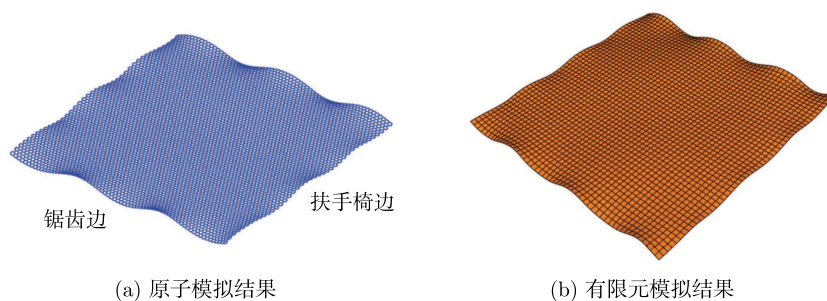


图 4 石墨烯边界产生的翘曲现象<sup>[66]</sup>

### 3.2 石墨烯的杨氏模量、强度等基本力学性能参数的预测

石墨烯的杨氏模量、泊松比、抗拉强度等基本力学性能参数的预测是近年来石墨烯力学性能研究的主要内容之一.需要指出的是,杨氏模量等力学性能参数是属于连续介质框架下的力学概念,由于石墨烯是由单层碳原子构成,其厚度必须采用连续介质假设后计算其力学性能参数才有意义.但到目前为止,人们尚未对此形成统一的认识.有些研究学者取此厚度为 0.066 nm<sup>[37,71]</sup>,略小于单个碳原子的半径,更多的研究学者取石墨晶体的层间距 0.335 nm<sup>[7,72-73]</sup>.因此采用不同的厚度定义方式,得到的应力和杨氏模量等结果是不同的.

在实验测试方面,由于石墨烯的二维结构,传统的宏观材料测试方法和技术很难获得石墨烯有效的力学性能参数,原子力纳米压痕实验系统得到了较多的应用. Lee 等<sup>[7]</sup>将石墨烯置于带有孔状结构的 Si 衬底表面,首次利用原子力显微镜纳米压痕实验研究了石墨烯的弹性性质和断裂强度,得到压头压入深度与所施加的力的关系曲线,如图 5 所示,并辅以连续介质力学分析,假设石

墨烯厚度为 0.335 nm,得到石墨烯的杨氏模量为 (1.0±0.1) TPa,理想强度为 (130±10) GPa. 另外 Lee 等<sup>[74]</sup>还利用原子力显微镜研究了石墨烯的摩擦力学行为. Gómez-Navarro 等<sup>[75]</sup>利用化学还原氧化石墨烯法制备得到了单层石墨烯,并利用原子力显微镜测试了其弹性性能,发现石墨烯具有很高的柔韧性,假设石墨烯的厚度为 1 nm,得到其杨氏模量为 (0.25±0.15) TPa. Poot 等<sup>[76]</sup>采用原子力纳米压痕实验测试了多层石墨烯的弯曲刚度和应力特性,并研究了与薄膜厚度的依赖关系.研究表明,弯曲刚度和张应力随薄膜厚度的增加而增加. Frank 等<sup>[77]</sup>利用原子力显微镜测得不多于 5 层的石墨烯的有效弹簧常数介于 1~5 N/m,通过拟合双端固支的受拉梁模型得到石墨烯的杨氏模量为 0.5 TPa,远低于石墨的面内杨氏模量 1 TPa.

在数值模拟方面,国内外学者主要采用第一原理从头计算方法、分子结构力学方法、蒙特卡罗方法和分子动力学方法研究石墨烯的力学性能,包括石墨烯基本力学性能参数,如杨氏模量、泊松比、强度等的预测,以及石墨烯变形破坏机制的研究.

Liu 等<sup>[78]</sup>利用第一原理计算预测了石墨烯的

杨氏模量为 1.05 TPa, 泊松比为 0.186, 并得到扶手椅型和锯齿型石墨烯的理想强度分别为 110 GPa 和 121 GPa. Lier 等<sup>[79]</sup>、Konstantinova 等<sup>[80]</sup> 和 Faccio 等<sup>[81]</sup> 均采用第一原理从头计算研究了石墨烯的弹性性能, 假设石墨烯的厚度为 0.34 nm, 得到的杨氏模量分别为 1.11 TPa, 1.24 TPa 和 0.96 TPa.

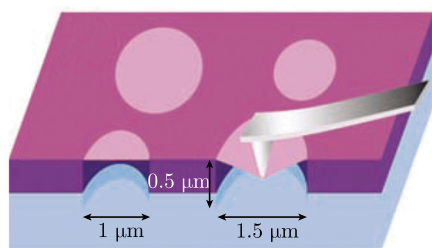
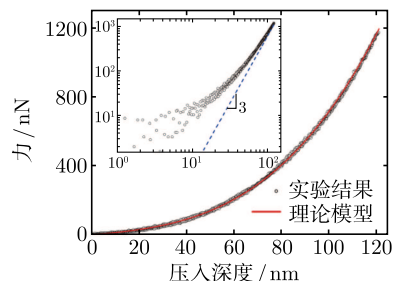


图 5 纳米压痕试验示意图以及所得到的力-位移关系曲线<sup>[7]</sup>

Kudin 等<sup>[82]</sup> 和 Sánchez-Portal 等<sup>[83]</sup> 也采用从头计算方法研究了石墨烯的弹性性能, 但回避了定义石墨烯厚度所产生的差异问题, 他们用应变能对应变的二阶导数  $\partial^2 U / \partial \epsilon^2$  来表征石墨烯的有效弹性刚度, 计算得到石墨烯的  $\partial^2 U / \partial \epsilon^2$  分别为 57.3 eV 和 60 eV, 计算结果基本一致.



Sakhaee-Pour 等<sup>[84-86]</sup> 采用分子结构力学方法, 将分子模型等价于空间梁结构, 研究了石墨烯的弹性性能和振动力学特性, 得到石墨烯的杨氏模量为 0.992~1.042 TPa, 剪切模量为 0.21~0.23 TPa. Meo 等<sup>[87]</sup> 采用基于有限元的分子力学方法研究了石墨烯的拉伸力学性能, 得到石墨烯的平均杨氏模量为 0.945 TPa. Li 等<sup>[32]</sup> 和 Xiao 等<sup>[88]</sup> 采用改进的分子结构力学方法研究了石墨烯和碳纳米管的破坏, 特别研究了缺陷的影响. Zakharchenko 等<sup>[89]</sup> 基于 LCBOP II 键序势采用蒙特卡洛方法计算得到石墨烯的绝热杨氏模量和等温杨氏模量分别为  $(353 \pm 4)$  N/m 和  $(355 \pm 21)$  N/m (假设石墨烯的厚度为 0.335 nm, 分别约为 1.054 TPa 和 1.060 TPa), 与 Lee 等<sup>[7]</sup> 的实验结果  $(340 \pm 50)$  N/m 吻合较好.

Bao 等<sup>[90]</sup> 采用 REBO 势对 1~5 层的石墨烯的拉伸进行了分子动力学模拟, 得到单层石墨烯的杨氏模量为 1.031 TPa. Gupta 等<sup>[91]</sup> 基于修正的 Tersoff-Brenner 势, 采用分子动力学方法计算得到了石墨烯的杨氏模量为 1.290 TPa, 泊松比为 0.160. Zhao 等<sup>[92]</sup> 分别采用正交紧束缚方法和基于 AIREBO 势的分子动力学方法研究了石墨烯单轴拉伸弹性性能的尺寸和手性相关性. 分子动力学模拟得到石墨烯的杨氏模量为  $(1.010 \pm 0.030)$  TPa, 泊松比为  $0.21 \pm 0.01$ , 紧束缚模拟得到的杨氏模量为 0.910 TPa. 研究还发现, 锯齿型石墨烯的断裂应变和断裂强度大于扶手椅型的, 石墨烯的杨氏模量随着尺寸的减小而减小, 而泊松比随尺寸的变化规律则相反. Bu 等<sup>[93]</sup> 利用分子动力学方法

研究了石墨烯条带的力学性能, 得到石墨烯条带的断裂应变约为 0.303, 理想强度为 175 GPa, 研究还发现条带的宽度对石墨烯的杨氏模量和断裂强度有轻微的影响. 韩同伟等<sup>[69]</sup> 基于 Tersoff 势, 利用分子动力学方法研究了石墨烯的拉伸力学性能, 得到石墨烯的杨氏模量为 1.031~1.058 TPa, 拉伸强度为 150~180 GPa. 另外, 还研究了石墨烯的拉伸变形破坏机制, 发现石墨烯在拉伸载荷的作用下, 薄膜边缘六角元胞首先转变为五角元胞形成缺陷, 随着应变增大缺陷增多, 碳碳键逐渐断裂, 最终导致薄膜破坏. 如图 6 所示. 杨晓东等<sup>[94]</sup> 采用分子动力学方法模拟了石墨烯的纳米压痕试验, 并讨论了压头速度、压头半径以及边界条件等因素的影响, 测得石墨烯的弹性模量为 1.053 TPa, 强度为 243.6 GPa.

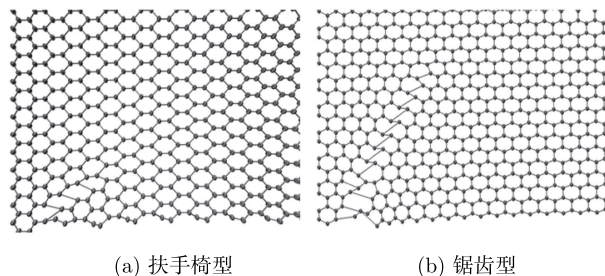


图 6 石墨烯拉伸破坏时的局部原子构型<sup>[69]</sup>

理论分析方面, 清华大学黄克智<sup>[95]</sup> 提出了“石墨烯的基于原子势的线弹性壳体理论”, 采用小变形的线弹性壳体理论, 直接由原子势解析地导出了石墨烯的拉伸刚度和弯曲刚度, 石墨烯的厚度和弹性模量也可由原子势函数得到, 但它们并不是一个固定的值, 而是依赖于加载的方式. 由

原子势得到的石墨烯线弹性本构关系是各向同性的,但与经典的各向同性平板理论不同,石墨烯的小变形扭转刚度为零,由原子势得到的石墨烯的弯曲刚度仅依赖于多体原子势中原子键夹角的部分,它不同于经典壳体中由中性面两侧拉/压形成的弯曲刚度.另外,该研究组<sup>[49]</sup>进一步发展了“基于原子势的有限变形壳体理论”,通过格林应变张量与曲率张量来表示变形过程中原子键长以及相邻键间的夹角,并将原子键能在特征单元内连续化为应变能,得到内力和内力矩与应变和曲率之间的率形式关系.美国得克萨斯大学奥斯汀分校 Huang 等<sup>[96-97]</sup>利用原子模拟和连续介质力学相结合研究了石墨烯的力学性能,发展了适用于石墨烯面内和弯曲变形的非线性介质力学理论框架.华南理工大学韩强教授课题组<sup>[30]</sup>在利用连续介质力学理论研究碳纳米管力学性能等方面也做了大量的研究工作.

由以上研究可以发现,石墨烯具有非常优异的力学性能,其杨氏模量约为 1 TPa,与单壁碳纳米管的相当,石墨烯的强度约为 130~180 GPa,是目前世界上发现的强度最高的材料之一.另外,在小应变范围内石墨烯的力学性能并不强烈依赖于其手性.

### 3.3 石墨烯力学性能的温度相关性和应变率相关性

石墨烯极其优异的力学性能与碳原子之间的化学键和电子结构有着紧密的联系,面内全部由  $\sigma$  键构成的石墨烯,所有碳原子被束缚在同一个平面内,使其具有超高的强度、刚度和韧性以及

独特的变形机制.另一方面,根据统计热力学理论,温度的高低决定了碳原子热振动的剧烈程度.因此,温度的改变必然会引起石墨烯力学行为的变化. Ozaki 等<sup>[98]</sup>和 Ni 等<sup>[99]</sup>以及 Yakobson 等<sup>[100]</sup>通过对碳纳米管轴向压缩和轴向拉伸的数值模拟均表明,碳纳米管的力学性能对温度有一定的依赖性. Zakharchenko 等<sup>[89]</sup>基于 LCBOPH 键序势采用蒙特卡罗方法研究了石墨烯弹性性能和热力学特性的温度相关性,模拟结果显示,在 0~2200 K,石墨烯的泊松比随温度的升高而减小,最后趋近于 0.1.当温度低于 900 K 时,石墨烯的剪切模量和绝热杨氏模量随温度的升高而增大,而高于 900 K 时,剪切模量和绝热杨氏模量随温度的升高而减小.韩同伟等<sup>[101]</sup>利用分子动力学方法,研究了扶手椅型和锯齿型石墨烯拉伸力学性能的温度相关性.研究表明,两种不同手性石墨烯的杨氏模量、抗拉强度、拉伸极限应变均随温度的升高而显著减小,如图 7 所示.系统温度越高,系统的总动能就越大,从热力学观点来看,系统内部原子的热运动越激烈,故随着温度的升高,原子更活跃,原子在其平衡位置产生振动的幅度越大.在外载作用下,高温时原子之间的相互吸引力相对减小,原子更容易脱离固有的平衡位置而失稳.通过对石墨烯在不同温度下的原子变形构型研究发现,温度对石墨烯的变形机制有一定的影响.在高温时缺陷除了在边缘处形成外,有时还会形成于薄膜内部某处.而且,在高温时有时会有几个缺陷同时存在.温度愈高,造成缺陷的机会愈多,从而导致抗拉强度和拉伸极限应变减小.

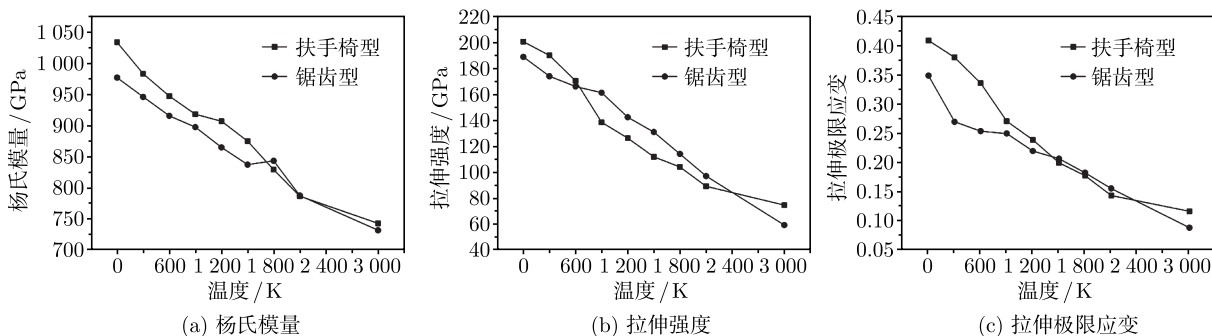
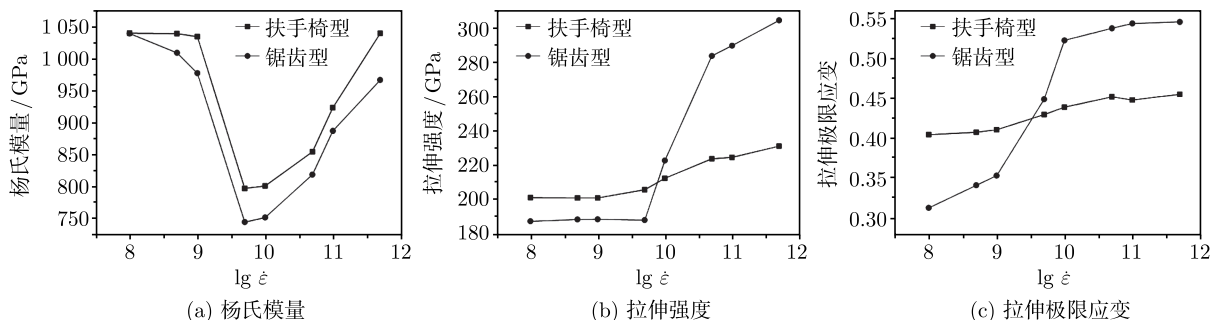


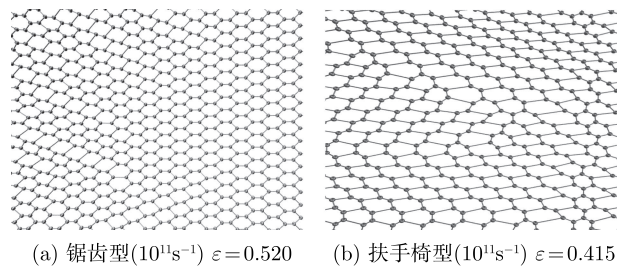
图 7 石墨烯力学性能随温度的变化趋势<sup>[101]</sup>

宏观材料的强度随应变率的增大而提高<sup>[102-103]</sup>,在纳米尺度下铜、镍等金属纳米材料的力学性能也表现出明显的应变率敏感性<sup>[104-115]</sup>,不同材料的应变率敏感性有所差异.韩同伟等<sup>[116]</sup>

利用分子动力学方法模拟了锯齿型和扶手椅型石墨烯在不同应变率下的拉伸力学性能,结果发现,石墨烯的力学性能表现出强烈的应变率相关性.如图 8 所示.

图 8 石墨烯力学性能随应变率的变化趋势<sup>[116]</sup>

石墨烯的拉伸力学性能存在一个临界应变率, 大约为  $5 \times 10^9 \text{s}^{-1}$ . 在该临界应变率以下, 杨氏模量随应变率的增大而减小, 而高于该临界应变率时, 杨氏模量随应变率的增大而增大. 产生这一现象的原因有待进一步研究. 一般来讲, 纳米材料的弹性模量对应变率不很敏感或随应变率的提高而稍微减小<sup>[106-107]</sup>. 石墨烯的拉伸强度在临界应变率以下对应变率不敏感, 而高于该临界应变率时, 随应变率的增大而增大, 即存在应变率强化效应, 如图 8(b) 所示. 提高加载速率有利于提高材料的应变硬化能力, 但这种效应比温度效应要低得多<sup>[117]</sup>. 因此, 可通过增大加载速率, 降低温度来提高纳米材料的拉伸变形能力<sup>[112-118]</sup>. 在不同的应变率下, 石墨烯具有不同的拉伸破坏变形机制. 在低应变率下, 石墨烯沿主断裂带断裂破坏, 而在高应变率下, 在边缘或内部形成了四边形缺陷簇, 具有非晶化特征, 如图 9 所示. 形成的缺陷簇内的碳-碳键并未完全断裂, 石墨烯仍能继续承受外载, 导致强度提高. 从能量角度讲, 沿局部单一裂纹开裂破坏所吸收的能量少, 而高应变率下, 石墨烯要在短时间内造成多区域非晶化, 可以吸收更多的能量, 强度明显提高.

图 9 石墨烯在高应变率下出现的非晶化特征<sup>[116]</sup>

### 3.4 原子尺度缺陷和掺杂等对石墨烯力学性能的影响

完美的石墨烯是由单层  $\text{sp}^2$  碳原子组成的六方蜂巢状二维理想结构, 然而, 由于制造工艺的限

制, 实际制备中几乎无法获得完美的石墨烯, 石墨烯中不可避免地含有各种缺陷<sup>[70,119-121]</sup>, 如空位缺陷<sup>[122-124]</sup>(包括单原子空位缺陷和双原子空位缺陷等)、Stone-Wales (SW) 拓扑缺陷<sup>[125-126]</sup>、增原子缺陷<sup>[127-130]</sup> 和其他非拓扑结构缺陷<sup>[125]</sup> 等. 另外, 石墨烯中也可能存在各种杂质原子, 如氮掺杂、硼掺杂、 $^{14}\text{C}$  同位素缺陷等. 原子尺度缺陷和原子掺杂在一定程度上会影响石墨烯的形貌, 使得石墨烯发生变形引起残余应力, 对石墨烯的杨氏模量、电荷分布、价键作用等力、电性能产生重要影响<sup>[131-134]</sup>. 有效实现可控掺杂而改变石墨烯的力电性质也可以丰富石墨烯在传感、储能、电子器件等方面的应用. 另外, 将石墨烯用于增强复合材料, 缺陷的存在对石墨烯和基体之间的相互复合可能会产生有益的作用. 因此, 研究原子缺陷和掺杂对石墨烯力学性能的影响具有重要的理论意义和应用价值.

Hashimoto 等<sup>[119]</sup> 对石墨烯片层中存在的原子缺陷进行了直接实验观测, 他们通过高分辨率透射电子显微镜 (HRTEM) 实验并结合数值模拟手段对石墨烯中存在的典型缺陷及其稳定性进行了系统的研究, 结果显示原子空位缺陷 (包括单原子空位缺陷和双原子空位缺陷等), 增原子缺陷和 SW 缺陷为石墨烯中能稳定存在的典型原子缺陷, 如图 10 所示. 对于空位缺陷, 完美石墨烯中任一碳原子的缺失使临近碳原子成为两配位原子, 在管壁上便产生 3 个碳悬挂键, 如图 10(a). Krasheninikov 等<sup>[122,135]</sup> 对碳纳米管的研究结果表明, 这种具有 3 个悬挂键的空位缺陷是一种亚稳结构, 在温度不高于 1 000 K 时能够稳定存在, 当温度达到 2 000 K 或更高时, 他们发现有两个悬挂键彼此成键, 形成了由一个五环和一个碳悬挂键组成的结构缺陷, 此即所谓的 5-1DB 缺陷. 另外, 这种结构缺陷能否转变还与碳纳米管半径大小和手性密切相关. 对于石墨烯, 单原子空位缺陷在常温下

能稳定存在, 缺陷周围的原子并没有发生结构重组现象<sup>[119]</sup>. 石墨烯中的 SW 拓扑缺陷, 也称五边形-七边形缺陷, 为石墨烯中典型的拓扑缺陷之一<sup>[126]</sup>. 这种缺陷是由于“C-C”键绕其中点旋转 90°, 致使局部出现五边形环和七边形环的结构. 有时拓扑缺陷也会以两个五边形和一个八边形的形式存在, 称为“5-8-5”缺陷, 如图 10(b). 石墨烯

中的增原子缺陷一般出现在空位缺陷周围, 降低了增原子的流动性. 另外, 这种增原子只可能为碳原子, Hashimoto 等曾试图将碳原子置换为铁原子, 但结果与实验严重不符<sup>[119]</sup>. 图 10(c) 给出了石墨烯中两种典型的增原子缺陷, 其中包括一个增原子和一个空位缺陷, 3 个增原子和一个双原子空位缺陷.

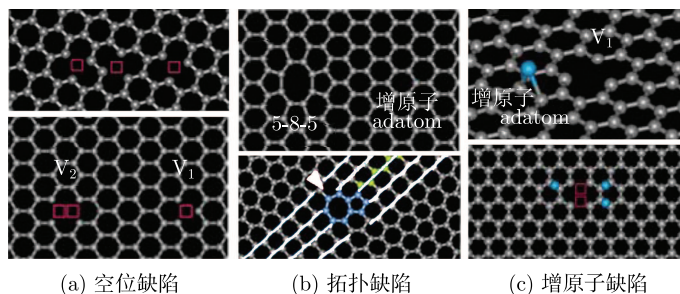


图 10 石墨烯中的典型原子缺陷<sup>[119]</sup>

韩同伟等<sup>[136-137]</sup> 主要根据文献 [119] 的研究结果, 在石墨烯中引入各种类型的原子缺陷, 采用分子动力学方法分别对含有空位原子缺陷、增原子缺陷以及 SW 缺陷的扶手椅型和锯齿型石墨烯的拉伸变形进行了数值模拟, 研究了不同原子尺度缺陷对石墨烯基本力学性能的影响, 并研究了缺陷对石墨烯破坏变形机制的影响. 研究表明, 少量的原子尺度缺陷对石墨烯的杨氏模量基本没有影响, 但缺陷的存在降低了石墨烯的抗拉强度和拉伸应变. 例如, 单原子空位缺陷使扶手椅型石墨烯的抗拉强度下降 8.10%, 使拉伸应变降低 10.95%. 缺陷的存在对石墨烯的变形破坏机制也产生了一定的影响. 对于没有缺陷的石墨烯, 缺陷首先形成于薄膜边缘处, 见图 6, 大体沿与载荷方向呈 45° 方向断裂, 但是对于含缺陷的石墨烯, 破坏方式尤其是缺陷的萌生位置, 与无缺陷石墨烯不同. 图 11 给出了含原子空位缺陷石墨烯在拉伸载荷作用下开始出现缺陷及断裂时的原子构型, 研究发现, 无论扶手椅型石墨烯, 还是锯齿型石墨烯, 新的缺陷的萌生位置均出现在单原子空位缺陷或双原子空位缺陷附近. 缺陷出现后, 附近的碳碳键最先断裂, 在拉伸载荷继续作用下, 碳碳键逐渐断裂, 形成断裂带破坏. 对于含 SW 拓扑缺陷和增原子缺陷的石墨烯的拉伸破坏, 也发现了相似的结论. Jiang 等<sup>[138]</sup> 采用分子动力学方法通过模拟石墨烯的热振动研究了 <sup>14</sup>C 同位素掺杂对石墨烯杨氏模量的影响. 研究发现, 在石墨烯 <sup>12</sup>C 系统中, 掺入 5% 以内的 <sup>14</sup>C 同位素基本不影响石墨烯

的杨氏模量, 然而继续增加 <sup>14</sup>C 至 20% 时, 石墨烯的杨氏模量会降低 15% 左右.

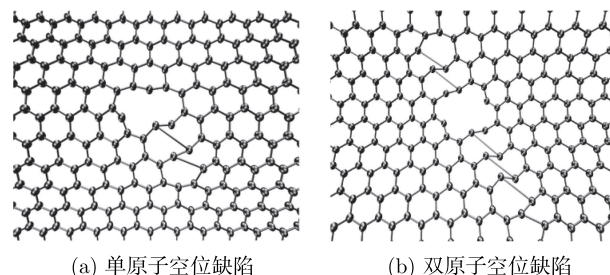


图 11 含空位缺陷石墨烯新缺陷萌生位置及断裂时的局部原子构型<sup>[136-137]</sup>

石墨烯的功能化和存在的原子尺度缺陷 (如 SW 缺陷、空位缺陷等) 均会使平整的石墨烯变为微弯扭曲, 进而影响石墨烯的电学、力学等各方面的性能<sup>[139-142]</sup>. Schniepp 等<sup>[140-141]</sup> 通过原子力显微镜探测研究了含缺陷和功能化后的单层石墨烯的弯曲特性, 如图 12 所示, 研究结果显示, 缺陷或官能团的存在会导致石墨烯由平整自发地转变为皱折, 如图 12(a) 所示. 通过实验并结合密度泛函理论计算发现, 石墨烯更容易在皱折处发生折起弯曲, 经多次来回折叠发现, 折叠处均发生在同一位置, 如图 12(b).

石墨烯的边界结构或边界化学修饰也会对石墨烯力学性能产生影响. Reddy 等<sup>[143]</sup> 分别对扶手椅型和锯齿型石墨烯构造了五边形-六边形缺陷边界, 五边形-七边形缺陷边界以及氢化边界, 基于 AIREBO 势函数, 模拟了边界结构对石墨烯的

弹性性能的影响. 研究表明, 当石墨烯片层的宽度小于 10 nm 时, 石墨烯的有效弹性模量强烈依赖于其边界结构和片层宽度. 随着片层宽度的增加, 这种边界结构效应逐渐消失, 有效弹性模量接近

一常数, 即为石墨烯材料体弹性模量, 计算结果为  $1\ 874.029\sim 1\ 917.218\ \text{eV}/\text{nm}^2$  (假设石墨烯的厚度为 0.335 nm, 约为  $0.896\sim 0.917\ \text{TPa}$ ), 与其他有关实验和模拟结果相比稍微偏小.

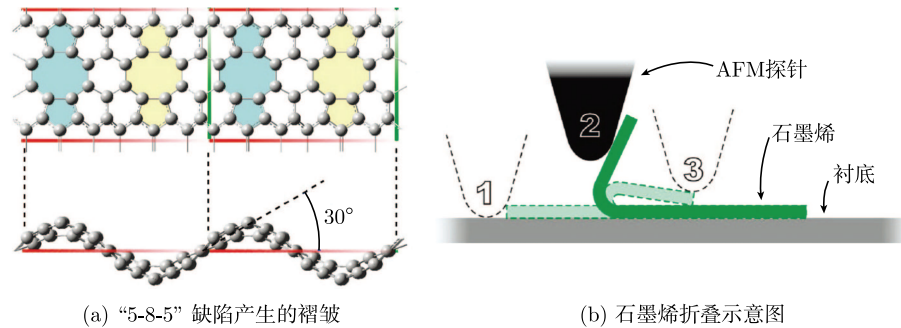


图 12 利用原子力显微镜研究石墨烯的弯曲特性<sup>[141]</sup>

### 3.5 石墨烯在纳米增强复合材料和微纳电子器件等领域的应用

石墨烯具有优异的力学、热学和电学性能, 有望在高性能纳电子器件、复合材料、场发射材料、气体传感器、能量存储等众多领域获得广泛应用, 但本文主要评述有关石墨烯力学性能方面的应用.

石墨烯自身具有极其优越的力学性能和物理性能, 而且石墨烯具有很大的比表面积, 其强度远高于碳纤维, 而在经济性方面远好于碳纳米管, 因此, 石墨烯为制备集超高导电、导热及力学性能等各种优越性能于一体的新型功能复合材料提供了一种理想的纳米填料. 研究表明<sup>[10-11,144-151]</sup>, 在聚合物中加入少量的石墨烯, 便能有效地增强聚合物的力学性能, 并能赋予复合材料新的功能. Ra-

manathan 等<sup>[10]</sup> 将表面含有羟基、羧基等化学基团的官能化石墨烯 (FGS) 加入到一些极性高分子中, 如聚甲基丙烯酸甲酯 (PMMA) 等, 制备出了石墨烯/聚甲基丙烯酸甲酯等纳米复合材料. 研究表明, 加入少量的官能化石墨烯可有效提高聚甲基丙烯酸甲酯的热学和力学性能, 如加入 1% 重量的石墨烯可使弹性模量提高 80%, 使极限强度提高 20%, 其增强效果比单壁碳纳米管 (SWNTs) 和膨化石墨 (EG) 都要好, 如图 13(a) 所示. 通过对比纳米复合材料的断口形貌发现, 被拉出的膨化石墨填料周围较洁净平整, 而石墨烯填料周围被吸附的聚合物厚厚包裹, 如图 13(b) 和 13(c) 所示, 表明石墨烯与聚合物之间存在较强的相互作用, 而膨化石墨与聚合物之间的相互作用较弱.

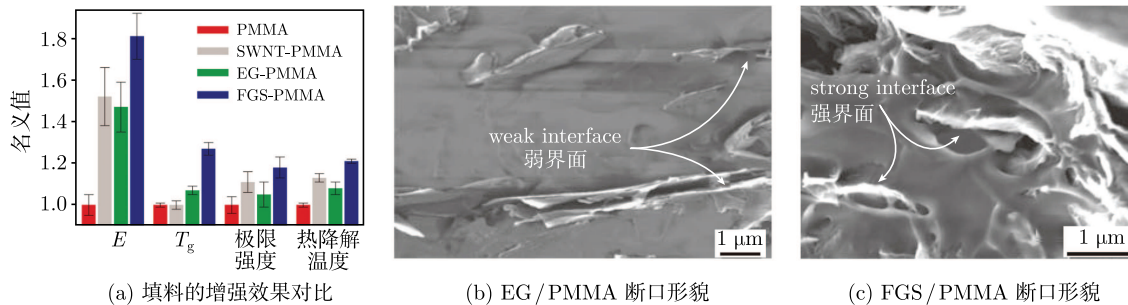


图 13 石墨烯/聚甲基丙烯酸甲酯纳米复合材料热学、力学性能的提高及其断口形貌<sup>[10]</sup>

Das 等<sup>[146]</sup> 利用纳米压痕技术研究了由几层石墨烯增强的聚甲基丙烯酸甲酯 (PMMA) 和聚乙烯醇 (PVA) 纳米复合材料的力学性能, 研究发现, 加入 0.6% 重量的石墨烯可大大提高聚甲基丙烯酸甲酯和聚乙烯醇的弹性模量和硬度. Fang 等<sup>[144]</sup>

制备了官能化石墨烯/聚苯乙烯 (PS) 纳米复合材料, 加入 0.9% 重量的石墨烯使拉伸强度和杨氏模量分别提高 70% 和 57%. Liang 等<sup>[147]</sup> 将氧化石墨烯均匀分散于聚乙烯醇中, 研究发现, 加入 0.7% 重量的氧化石墨烯可使聚乙烯醇的拉伸强度和杨

氏模量分别提高 76% 和 62%。Xu 等<sup>[148]</sup> 的研究结果显示, 加入 3% 重量的氧化石墨烯可使聚乙烯醇的拉伸强度和杨氏模量分别提高 70% 和 128%。Zhao 等<sup>[149]</sup> 的研究结果显示, 加入 1.8% 体积的氧化石墨烯可使聚乙烯醇的拉伸强度提高 150%, 使杨氏模量提高近 10 倍。Rafiee 等<sup>[150-151]</sup> 对比研究了石墨烯、单壁碳纳米管、多壁碳纳米管和纳米黏土等对环氧树脂的增强效果, 研究发现, 石墨烯的增强效果最好, 加入 0.1% 重量的石墨烯能大幅度提高环氧树脂的杨氏模量、拉伸强度、断裂韧性和抗疲劳性能等。

石墨烯具有比膨化石墨和纳米黏土更好的单层分散结构, 通过表面官能化形成可控的化学缺陷, 例如表面羟基、羰基、环氧基等, 加入到聚合物等基体材料中可有效改善基体材料的力学性能, 其增强机理主要取决于以下几个方面。首先, 羟基等官能团和制备氧化石墨过程中形成的缺陷均会使石墨烯变为皱褶的形态, 这些纳米级别的表面不平整性可增强石墨烯与聚合物链之间的相互作用。其次, 官能化石墨烯表面含有的羟基、羧基等化学基团, 可与极性高分子如聚甲基丙烯酸甲酯中的羰基形成较强的氢键。最后, 石墨烯具有很大的比表面积, 加上石墨烯的分子级分散, 可与聚合物之间形成较强的界面作用, 显著改善了界面的载荷传递, 从而达到较好的增强效果。

除了利用石墨烯的高杨氏模量、高强度等优异力学性能发展增强的复合材料外, 石墨烯还具有低抗弯刚度, 加上自身超凡的导电性和透明性, 石墨烯在柔性微纳电子器件领域也表现出巨大的应用潜力。Patra 等<sup>[152]</sup> 采用不同形状的石墨烯自动包裹液滴, 像折纸一样制成功能化的纳米器件。但是, 该过程是一次性不可控的。中国科学院力学研究所赵亚溥研究组<sup>[153]</sup> 首次采用分子动力学模拟实现了课题组提出的“电弹性毛细”(electro-elasto-capillarity, EEC) 现象, 采用电场来控制石墨烯包裹液滴的系统, 利用前驱膜在电润湿中特殊的输运性质, 使得石墨烯多次、可控地包裹或者解包裹液滴, 如图 14 所示。该研究工作不仅丰富了人们对于润湿、电润湿的认识, 而且展示了石墨烯在微纳尺度药物运输、MEMS 器件操控等领域潜在的应用前景。

另外, 研究发现<sup>[154-155]</sup>, 石墨烯是制作柔性透明电极的理想材料, 有望取代资源缺乏、缺乏柔韧性的氧化铟锡 (indium tin oxide, ITO)。香港理

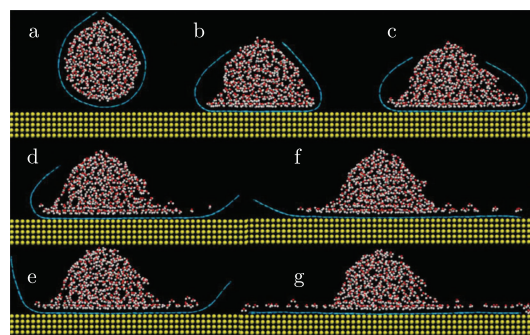


图 14 “电弹性毛细”现象的动力学过程<sup>[153]</sup>

工大学郑子剑研究组<sup>[155]</sup> 成功制备了高导电率和高透光率的石墨烯复合材料透明电极, 在上千次的弯曲测试中, 电极显示了极好的稳定性, 导电性没有明显降低, 使用该电极制备的有机发光二极管在发光效果上也比基于 ITO 电极的器件高出 2 倍。此外, 美国康奈尔大学 Bunch 等<sup>[156]</sup> 利用仅有一个原子厚的石墨烯制造出了世界上最薄的气球, 这个由石墨烯封装的所谓微腔甚至不能渗透微小的空气分子 (包括氦) 表现出很强的防漏性能。该项技术的应用范围包括传感器、滤光片以及原子级的材料成像等。

总之, 石墨烯被认为是目前综合性能最好的一种纳米材料, 被誉为新一代战略材料。如果可以充分地利用石墨烯的厚度薄、拓扑简单、杨氏模量高、抗弯刚度低等力学特性, 可以进一步拓展石墨烯的应用领域。

## 4 结 语

自从 2004 年安德烈·盖姆等发现石墨烯以来, 关于石墨烯的研究不断取得突破性进展, 充分展示了石墨烯在理论研究和实际应用领域的巨大潜力和发展前景。本文主要介绍了近年来国内外在石墨烯力学性能的实验测量、理论计算等研究方面的前沿进展。石墨烯具有非常优异的力学性能, 特别是这种二维纳米结构所固有的高刚度和高强度。然而, 与物理化学性质研究相比, 关于石墨烯的力学研究仍然处于起始阶段, 石墨烯和石墨烯结构中所蕴含的力学科学问题仍需要进一步挖掘, 许多力学现象和奇异力学行为仍需得到更深层次的理论解释。我们认为, 关于石墨烯的力学研究在以下方面仍期待更多的突破。(1) 石墨烯拉伸、压缩、剪切等基本力学行为的实验测试及其相关机制; (2) 石墨烯在力电磁热等多物理场条件下的复杂力学行为及相关机制; (3) 多层石墨烯的力学行

为; (4) 化学改性 (如硼、硅掺杂)、原子尺度缺陷 (如缺陷密度及分布) 等因素对石墨烯的力学性能的影响及相关机制。另外, 虽然石墨烯是一种新型的理想纳米填料, 然而目前以石墨烯增强的复合材料远未达到预期性能, 如何有效控制界面的应力传递效率而增强界面区域的力学性能进而实现复合材料功能化和高性能化也是一个有待系统研究的课题。

总之, 近年来石墨烯的物理研究热潮正在世界范围内展开, 关于石墨烯的力学研究刚刚开始, 尤其是我国科学家在该领域起步较晚。这需要我国力学、材料学等领域的研究人员积极投身石墨烯的研究, 力争在国际上占有一席之地, 为实现石墨烯的实际应用奠定科学和技术基础。

### 参 考 文 献

- Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, et al. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, 2004, 306(5696): 666-669
- van den Brink J. Graphene: from strength to strength. *Nature Nanotechnology*, 2007, 2(4): 199-201
- Geim A K, Novoselov K S. The rise of graphene. *Nature Materials*, 2007, 6(3): 183-191
- Avouris P, Chen Z, Perebeinos V. Carbon-based electronics. *Nature Nanotechnology*, 2007, 2(10): 605-615
- Li D, Kaner R B. Materials science: graphene-based materials. *Science*, 2008, 320(5880): 1170-1171
- Rao C N, Sood A K, Subrahmanyam K S, et al. Graphene: the new two-dimensional nanomaterial. *Angewandte Chemie International Edition in English*, 2009, 48(42): 7752-7777
- Lee C, Wei X, Kysar J W, et al. Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene. *Science*, 2008, 321(5887): 385-388
- Grantab R, Shenoy V B, Ruoff R S. Anomalous strength characteristics of tilt grain boundaries in graphene. *Science*, 2010, 330(6006): 946-948
- Balandin A A, Ghosh S, Bao W, et al. Superior thermal conductivity of single-layer graphene. *Nano Letters*, 2008, 8(3): 902-907
- Ramanathan T, Abdala A A, Stankovich S, et al. Functionalized graphene sheets for polymer nanocomposites. *Nature Nanotechnology*, 2008, 3(6): 327-331
- Stankovich S, Dikin D A, Dommett G H, et al. Graphene-based composite materials. *Nature*, 2006, 442(7100): 282-286
- Kotov N A. Materials science: carbon sheet solutions. *Nature*, 2006, 442(7100): 254-255
- Geim A K. Graphene: status and prospects. *Science*, 2009, 324(5934): 1530-1534
- 中国科学院. 2008 科学发展报告. 北京: 科学出版社, 2008
- 张晓林, 张志强. 国际科学技术前沿报告 2010. 北京: 科学出版社, 2010
- 傅敏, 王会才, 洪友士. 微米/纳米尺度的材料力学性能测试. *力学进展*, 2000, 30(3): 391-399
- 杨班权, 陈光南, 张坤, 等. 涂层/基体材料界面结合强度测量方法的现状与展望. *力学进展*, 2007, 37(1): 67-79
- 尚福林, 北村隆行, 平方宽之. 微纳米材料及其结构的界面强度的实验研究. *力学进展*, 2008, 38(4): 437-452
- 杨卫, 马新玲, 王宏涛, 等. 纳米力学进展. *力学进展*, 2002, 32(2): 161-174
- 张田忠, 郭万林. 纳米力学的数值模拟方法. *力学进展*, 2002, 32(2): 175-188
- 尚福林, 郭显聪, 北村隆行, 等. 纳米材料力学行为的原子尺度模拟研究. *力学进展*, 2010, 40(3): 263-283
- Chester M. *Primer of Quantum Mechanics*. New York: John Wiley, 1987
- Burkert U, Allinger N L. *Molecular Mechanics*. Washington, DC: American Chemical Society, 1982
- Binder K. *The Monte Carlo Method in Condensed Matter Physics*. Berlin: Springer-Verlag, 1995
- Berg B A. *Markov Chain Monte Carlo Simulations and Their Statistical Analysis*. Singapore: World Scientific, 2004
- Doucet A, Freitas N D, Gordon N. *Sequential Monte Carlo Methods in Practice*. New York: Springer-Verlag, 2001
- Allen M P, Tildesley D J. *Computer Simulation of Liquids*. Oxford: Clarendon Press, 1987
- Leach A. *Molecular Modelling: Principles and Applications (2nd Edition)*. New Jersey: Prentice Hall, 2001
- Frenkel S. 分子模拟. 从算法到应用. 江文川, 译. 北京: 化学工业出版社, 2002
- 韩强, 姚小虎. 碳纳米管的原子模拟和连续体描述. 北京: 科学出版社, 2007
- Odegard G M, Gates T S, Nicholson L M, et al. Equivalent-continuum modeling of nano-structured materials. *Compos Sci Technol*, 2002, 62(14): 1869-1880
- Li C Y, Chou T W. A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes. *Int J Solids Struct*, 2003, 40(10): 2487-2499
- Leung A Y T, Guo X, He X Q, et al. A continuum model for zigzag single-walled carbon nanotubes. *Appl Phys Lett*, 2005, 86(8): 083110
- Ru C Q. Axially compressed buckling of a doublewalled carbon nanotube embedded in an elastic medium. *J Mech Phys Solids*, 2001, 49(6): 1265-1279
- Wang C Y, Ru C Q, Mioduchowski A. Axially compressed buckling of pressured multiwall carbon nanotubes. *Int J Solids Struct*, 2003, 40(15): 3893-3911
- Ru C Q. Effect of van der Waals forces on axial buckling of a double-walled carbon nanotube. *J Appl Phys*, 2000, 87(10): 7227-7231
- Ru C Q. Effective bending stiffness of carbon nanotubes. *Phys Rev B*, 2000, 62(15): 9973-9976
- Govindjee S, Sackman J L. On the use of continuum mechanics to estimate the properties of nanotubes. *Solid State Commun*, 1999, 110(4): 227-230
- Gao X L, Li K. Finite deformation continuum model for single-walled carbon nanotubes. *Int J Solids Struct*, 2003, 40(26): 7329-7337
- Wang J B, Guo X, Zhang H W, et al. Energy and mechanical properties of single-walled carbon nanotubes predicted using the higher order Cauchy-Born rule. *Phys Rev B*, 2006, 73(11): 115428
- Arroyo M, Belytschko T. An atomistic-based finite deformation membrane for single layer crystalline films. *J Mech Phys Solids*, 2002, 50(9): 1941-1977
- Arroyo M, Belytschko T. A finite deformation membrane based on inter-atomic potentials for the transverse mechanics of nanotubes. *Mech Mater*, 2003, 35(3-6): 193-215

- 43 Arroyo M, Belytschko T. Continuum mechanics modeling and simulation of carbon nanotubes. *Meccanica*, 2005, 40(4-6): 455-469
- 44 Zhang P, Huang Y, Gao H, et al. Fracture nucleation in single-wall carbon nanotubes under tension: A continuum analysis incorporating interatomic potentials. *J Appl Mech-t Asme*, 2002, 69(4): 454-458
- 45 Zhang P, Huang Y, Geubelle P H, et al. The elastic modulus of single-wall carbon nanotubes: a continuum analysis incorporating interatomic potentials. *Int J Solids Struct*, 2002, 39(13-14): 3893-3906
- 46 Zhang P, Huang Y G, Geubelle P H, et al. On the continuum modeling of carbon nanotubes. *Acta Mech Sinica*, 2002, 18(5): 528-536
- 47 Zhang P, Jiang H, Huang Y, et al. An atomistic-based continuum theory for carbon nanotubes: analysis of fracture nucleation. *J Mech Phys Solids*, 2004, 52(5): 977-998
- 48 Guo X, Wang J B, Zhang H W. Mechanical properties of single-walled carbon nanotubes based on higher order Cauchy-Born rule. *Int J Solids Struct*, 2006, 43(5): 1276-1290
- 49 Wu J, Hwang K C, Huang Y. An atomistic-based finite-deformation shell theory for single-wall carbon nanotubes. *J Mech Phys Solids*, 2008, 56(1): 279-292
- 50 Wu J, Hwang K C, Huang Y, et al. A finite-deformation shell theory for carbon nanotubes based on the interatomic potential-Part I: basic theory. *J Appl Mech-t ASME*, 2008, 75(6): 061006
- 51 Wu J, Hwang K C, Song J, et al. A finite-deformation shell theory for carbon nanotubes based on the interatomic potential-Part II: instability analysis. *J Appl Mech-t ASME*, 2008, 75(6): 061007
- 52 吴坚. 基于原子势的碳纳米管有限变形壳体理论:[博士论文]. 北京: 清华大学, 2007
- 53 Lu W B, Wu J, Feng X, et al. Buckling analyses of double-Wall carbon nanotubes: A shell theory based on the interatomic potential. *J Appl Mech-t ASME*, 2010, 77(6): 061016
- 54 Wu J, Peng J, Hwang K C, et al. The intrinsic stiffness of single-wall carbon nanotubes. *Mech Res Commun*, 2008, 35(1-2): 2-9
- 55 Peierls R E. Bemerkungen über Umwandlungstemperaturen. *Helv Phys Acta*, 1934, 7: 81-83
- 56 Mermin N D, Wagner H. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic Heisenberg models. *Phys Rev Lett*, 1966, 17(22): 1133-1136
- 57 Mermin N D. Crystalline order in two dimensions. *Physical Review*, 1968, 176(1): 250-254
- 58 Nelson D R, Peliti L. Fluctuations in membranes with crystalline and hexatic order. *Journal de Physique*, 1987, 48(7): 1085-1092
- 59 Doussal P L, Radzihovsky L. Self-consistent theory of polymerized membranes. *Phys Rev Lett*, 1992, 69(8): 1209-1212
- 60 Novoselov K S, Jiang D, Schedin F, et al. Two-dimensional atomic crystals. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2005, 102(30): 10451-10453
- 61 Meyer J C, Geim A K, Katsnelson M I, et al. The structure of suspended graphene sheets. *Nature*, 2007, 446(7131): 60-63
- 62 Meyer J C, Geim A K, Katsnelson M I, et al. On the roughness of single- and bi-layer graphene membranes. *Solid State Commun*, 2007, 143(1-2): 101-109
- 63 Ishigami M, Chen J H, Cullen W G, et al. Atomic structure of graphene on SiO<sub>2</sub>. *Nano Letters*, 2007, 7(6): 1643-1648
- 64 Fasolino A, Los J H, Katsnelson M I. Intrinsic ripples in graphene. *Nature Materials*, 2007, 6(11): 858-861
- 65 Carlsson J M. Buckle or break. *Nature Materials*, 2007, 6(11): 801-802
- 66 Shenoy V B, Reddy C D, Ramasubramaniam A, et al. Edge-stress-induced warping of graphene sheets and nanoribbons. *Phys Rev Lett*, 2008, 101(24): 245501
- 67 Reddy C D, Rajendran S, Liew K M. Equilibrium configuration and continuum elastic properties of finite sized graphene. *Nanotechnology*, 2006, 17(3): 864-870
- 68 韩同伟, 贺鹏飞. 石墨烯弛豫性能分子动力学模拟. *物理学报*, 2010, 59(5): 482-487
- 69 韩同伟, 贺鹏飞, 王健, 等. 单层石墨烯薄膜拉伸变形的分子动力学研究. *新型碳材料*, 2010, 25(4): 261-266
- 70 Gass M H, Bangert U, Bleloch A L, et al. Free-standing graphene at atomic resolution. *Nature Nanotechnology*, 2008, 3(11): 676-681
- 71 Yakobson B I, Brabec C J, Bernholc J. Nanomechanics of carbon tubes: instabilities beyond linear response. *Phys Rev Lett*, 1996, 76(14): 2511-2514
- 72 Ni Z H, Wang H M, Kasim J, et al. Graphene thickness determination using reflection and contrast spectroscopy. *Nano Letters*, 2007, 7(9): 2758-2763
- 73 Dresselhaus M S, Dresselhaus G, Eklund P C. Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes. San Diego: Academic Press, 1996
- 74 Lee C, Wei X D, Li Q Y, et al. Elastic and frictional properties of graphene. *Physica Status Solidi B-Basic Solid State Physics*, 2009, 246(11-12): 2562-2567
- 75 Gomez-Navarro C, Burghard M, Kern K. Elastic properties of chemically derived single graphene sheets. *Nano Letters*, 2008, 8(7): 2045-2049
- 76 Poot M, van der Zant H S J. Nanomechanical properties of few-layer graphene membranes. *Appl Phys Lett*, 2008, 92(6): 063111
- 77 Frank I W, Tanenbaum D M, van der Zande A M, et al. Mechanical properties of suspended graphene sheets. *J Vac Sci Technol B*, 2007, 25(6): 2558-2561
- 78 Liu F, Ming P M, Li J. Ab initio calculation of ideal strength and phonon instability of graphene under tension. *Phys Rev B*, 2007, 76(6): 064120
- 79 van Lier G, van Alsenoy C, van Doren V, et al. Ab initio study of the elastic properties of single-walled carbon nanotubes and graphene. *Chem Phys Lett*, 2000, 326(1-2): 181-185
- 80 Konstantinova E, Dantas S O, Barone P M V B. Electronic and elastic properties of two-dimensional carbon planes. *Phys Rev B*, 2006, 74(3): 035417
- 81 Faccio R, Denis P A, Pardo H, et al. Mechanical properties of graphene nanoribbons. *J Phys-condens Mat*, 2009, 21(28): 285304
- 82 Kudin K N, Scuseria G E, Yakobson B I. C<sub>2</sub>F, BN, and C nanoshell elasticity from ab initio computations. *Phys Rev B*, 2001, 64(23): 235406
- 83 Sánchez-Portal D, Artacho E, Soler J M. Ab initio structural, elastic, and vibrational properties of carbon nanotubes. *Phys Rev B*, 2008, 59(19): 12678-12688
- 84 Sakhaee-Pour A. Elastic buckling of single-layered graphene sheet. *Comp Mater Sci*, 2009, 45(2): 266-270
- 85 Sakhaee-Pour A. Elastic properties of single-layered graphene sheet. *Solid State Commun*, 2009, 149(1-2): 91-95

- 86 Sakhiae-Pour A, Ahmadian M T, Naghdabadi R. Vibrational analysis of single-layered graphene sheets. *Nanotechnology*, 2008, 19(8): 085702
- 87 Meo M, Rossi M. Prediction of Young's modulus of single wall carbon nanotubes by molecular-mechanics based finite element modelling. *Compos Sci Technol*, 2006, 66(11-12): 1597-1605
- 88 Xiao J R, Staniszewski J, Gillespie J W. Fracture and progressive failure of defective graphene sheets and carbon nanotubes. *Compos Struct*, 2009, 88(4): 602-609
- 89 Zakharchenko K, Katsnelson M, Fasolino A. finite temperature lattice properties of graphene beyond the quasi-harmonic approximation. *Phys Rev Lett*, 2009, 102(4): 046808
- 90 Bao W X, Zhu C C, Cui W Z. Simulation of Young's modulus of single-walled carbon nanotubes by molecular dynamics. *Physica B-Condensed Matter*, 2004, 352(1-4): 156-163
- 91 Gupta S, Dharamvir K, Jindal V K. Elastic moduli of single-walled carbon nanotubes and their ropes. *Phys Rev B*, 2005, 72(16): 165428
- 92 Zhao H, Min K, Aluru N R. Size and chirality dependent elastic properties of graphene nanoribbons under uniaxial tension. *Nano Letters*, 2009, 9(8): 3012-3015
- 93 Bu H, Chen Y F, Zou M, et al. Atomistic simulations of mechanical properties of graphene nanoribbons. *Phys Lett A*, 2009, 373(37): 3359-3362
- 94 杨晓东, 贺鹏飞, 吴艾辉, 等. 石墨烯纳米压痕实验的分子动力学模拟. 中国科学 G 辑: 物理学力学天文学, 2010, 40(3): 353-360
- 95 Huang Y, Wu J, Hwang K C. Thickness of graphene and single-wall carbon nanotubes. *Phys Rev B*, 2006, 74(24): 245413
- 96 Lu Q, Arroyo M, Huang R. Elastic bending modulus of monolayer graphene. *J Phys D Appl Phys*, 2009, 42(10): 102002
- 97 Lu Q, Huang R. Nonlinear mechanics of single-atomic-layer graphene sheets. *International Journal of Applied Mechanics*, 2009, 1(3): 443-467
- 98 Ozaki T, Iwasa Y, Mitani T. Stiffness of single-walled carbon nanotubes under large strain. *Phys Rev Lett*, 2000, 84(8): 1712-1715
- 99 Ni B, Sinnott S B, Mikulski P T, et al. Compression of carbon nanotubes filled with C<sub>60</sub>, CH<sub>4</sub>, or Ne: predictions from molecular dynamics simulations. *Phys Rev Lett*, 2002, 88(20): 205505
- 100 Yakobson B I, Campbell M P, Brabec C J, et al. High strain rate fracture and C-chain unraveling in carbon nanotubes. *Comp Mater Sci*, 1997, 8(4): 341-348
- 101 韩同伟, 贺鹏飞, 王健, 等. 石墨烯拉伸力学性能温度相关性的数值模拟. 同济大学学报 (自然科学版), 2009, 37(12): 1638-1642
- 102 Lee W S, Lin C F. Impact properties and microstructure evolution of 304L stainless steel. *Mat Sci Eng A-struct*, 2001, 308(1-2): 124-135
- 103 Meyers M A. Dynamics Behavior of Materials. New York: John Wiley & Sons Inc, 1994
- 104 Chen J, Lu L, Lu K. Hardness and strain rate sensitivity of nanocrystalline Cu. *Scripta Mater*, 2006, 54(11): 1913-1918
- 105 Dalla Torre F, van Swygenhoven H, Victoria M. Nanocrystalline electrodeposited Ni: microstructure and tensile properties. *Acta Mater*, 2002, 50(15): 3957-3970
- 106 Ju S P, Lee W J, Lin J S, et al. Strain rate effect on tensile behavior of the helical multi-shell gold nanowires. *Mater Chem Phys*, 2006, 100(1): 48-53
- 107 Koh S J, Lee H P. Molecular dynamics simulation of size and strain rate dependent mechanical response of FCC metallic nanowires. *Nanotechnology*, 2006, 17(14): 3451-3467
- 108 Liu Z L, You X C, Zhuang Z. A mesoscale investigation of strain rate effect on dynamic deformation of single-crystal copper. *Int J Solids Struct*, 2008, 45(13): 3674-3687
- 109 Lu L, Li S X, Lu K. An abnormal strain rate effect on tensile behavior in nanocrystalline copper. *Scripta Mater*, 2001, 45(10): 1163-1169
- 110 Schwaiger R, Moser B, Dao M, et al. Some critical experiments on the strain-rate sensitivity of nanocrystalline nickel. *Acta Mater*, 2003, 51(17): 5159-5172
- 111 Wang Y M, Hamza A V, Ma E. Temperature-dependent strain rate sensitivity and activation volume of nanocrystalline Ni. *Acta Mater*, 2006, 54(10): 2715-2726
- 112 Wang Y M, Ma E. Temperature and strain rate effects on the strength and ductility of nanostructured copper. *Appl Phys Lett*, 2003, 83(15): 3165-3167
- 113 Wang Y M, Ma E. Strain hardening, strain rate sensitivity, and ductility of nanostructured metals. *Materials Science and Engineering a-Structural Materials Properties Microstructure and Processing*, 2004, 375-(77): 46-52
- 114 Wen Y H, Zhu Z Z, Zhu R Z. Molecular dynamics study of the mechanical behavior of nickel nanowire: Strain rate effects. *Comp Mater Sci*, 2008, 41(4): 553-560
- 115 徐洲, 梁海弋, 王秀喜. 纳米丝应变率效应的分子动力学模拟. 固体力学学报, 2003, 24(2): 229-234
- 116 韩同伟, 贺鹏飞, 王健, 等. 单层石墨烯薄膜拉伸破坏应变率相关性的分子动力学研究. 中国科学 G 辑: 物理学力学天文学, 2009, 39(9): 1312-1319
- 117 Reed R P, Clark A F. Materials at Low Temperatures. Metals Park (OH): American Society for Metals, 1983
- 118 Wang Y M, Ma E. Three strategies to achieve uniform tensile deformation in a nanostructured metal. *Acta Mater*, 2004, 52(6): 1699-1709
- 119 Hashimoto A, Suenaga K, Gloter A, et al. Direct evidence for atomic defects in graphene layers. *Nature*, 2004, 430(7002): 870-873
- 120 Meyer J C, Kisielowski C, Erni R, et al. Direct imaging of lattice atoms and topological defects in graphene membranes. *Nano Letters*, 2008, 8(11): 3582-3586
- 121 Ma J, Alfe D, Michaelides A, et al. Stone-Wales defects in graphene and other planar sp(2)-bonded materials. *Phys Rev B*, 2009, 80(3): 033407
- 122 Krashennnikov A V, Nordlund K, Sirvio M, et al. Formation of ion-irradiation-induced atomic-scale defects on walls of carbon nanotubes. *Phys Rev B*, 2001, 63(24): 245405
- 123 Telling R H, Ewels C P, El-Barbary A A, et al. Wigner defects bridge the graphite gap. *Nature Materials*, 2003, 2(5): 333-337
- 124 El-Barbary A A, Telling R H, Ewels C P, et al. Structure and energetics of the vacancy in graphite. *Phys Rev B*, 2003, 68(14): 144107
- 125 Stone A J, Wales D J. Theoretical studies of icosahedral C<sub>60</sub> and some related species. *Chem Phys Lett*, 1986, 128(5-6): 501-503
- 126 Ewels C P, Telling R H, El-Barbary A A, et al. Metastable Frenkel pair defect in graphite: Source of Wigner energy? *Phys Rev Lett*, 2003, 91(2): 025505
- 127 Krashennnikov A V, Nordlund K, Lehtinen P O, et al. Adsorption and migration of carbon adatoms on carbon

- nanotubes: Density-functional ab initio and tight-binding studies. *Phys Rev B*, 2004, 69(7): 073402
- 128 Nordlund K, Keinonen J, Mattila T. Formation of ion irradiation induced small-scale defects on graphite surfaces. *Phys Rev Lett*, 1996, 77(4): 699–702
- 129 Krasheninnikov A V, Nordlund K, Lehtinen P O, et al. Adsorption and migration of carbon adatoms on zigzag carbon nanotubes. *Carbon*, 2004, 42(5-6): 1021–1025
- 130 Lehtinen P O, Foster A S, Ayuela A, et al. Magnetic properties and diffusion of adatoms on a graphene sheet. *Phys Rev Lett*, 2003, 91(1): 017202
- 131 Lahiri J, Lin Y, Bozkurt P, et al. An extended defect in graphene as a metallic wire. *Nature Nanotechnology*, 2010, 5(5): 326–329
- 132 Carr L D, Lusk M T. Defect Engineering graphene gets designer defects. *Nature Nanotechnology*, 2010, 5(5): 316–317
- 133 Chi M, Zhao Y P. Adsorption of formaldehyde molecule on the intrinsic and Al-doped graphene: A first principle study. *Comp Mater Sci*, 2009, 46(4): 1085–1090
- 134 Guo B D, Liu Q A, Chen E D, et al. Controllable N-doping of graphene. *Nano Letters*, 2010, 10(12): 4975–4980
- 135 Krasheninnikov A V, Nordlund K. Stability of irradiation-induced point defects on walls of carbon nanotubes. *J Vac Sci Technol B*, 2002, 20(2): 728–733
- 136 韩同伟, 贺鹏飞, 王健, 等. 空位缺陷对单层石墨烯薄膜拉伸力学性能的影响. *同济大学学报 (自然科学版)*, 2010, 38(8): 1210–1214
- 137 韩同伟. 石墨烯力学性能分子动力学研究:[博士论文]. 上海: 同济大学, 2009.
- 138 Jiang J W, Wang J S, Li B W. Young's modulus of graphene: a molecular dynamics study. *Phys Rev B*, 2009, 80(11): 113405
- 139 Duplock E J, Scheffler M, Lindan P J D. Hallmark of perfect graphene. *Phys Rev Lett*, 2004, 92(22): 225502
- 140 Schniepp H C, Li J L, McAllister M J, et al. Functionalized single graphene sheets derived from splitting graphite oxide. *J Phys Chem B*, 2006, 110(17): 8535–8539
- 141 Schniepp H C, Kudin K N, Li J L, et al. Bending properties of single functionalized graphene sheets probed by atomic force microscopy. *ACS Nano*, 2008, 2(12): 2577–2584
- 142 McAllister M J, Li J L, Adamson D H, et al. Single sheet functionalized graphene by oxidation and thermal expansion of graphite. *Chem Mater*, 2007, 19(18): 4396–4404
- 143 Reddy C D, Ramasubramaniam A, Shenoy V B, et al. Edge elastic properties of defect-free single-layer graphene sheets. *Appl Phys Lett*, 2009, 94(10): 101904
- 144 Fang M, Wang K G, Lu H B, et al. Covalent polymer functionalization of graphene nanosheets and mechanical properties of composites. *J Mater Chem*, 2009, 19(38): 7098–7105
- 145 Verdejo R, Barroso-Bujans F, Rodriguez-Perez M A, et al. Functionalized graphene sheet filled silicone foam nanocomposites. *J Mater Chem*, 2008, 18(19): 2221–2226
- 146 Das B, Prasad K E, Ramamurthy U, et al. Nano-indentation studies on polymer matrix composites reinforced by few-layer graphene. *Nanotechnology*, 2009, 20(12): 125705
- 147 Liang J J, Huang Y, Zhang L, et al. Molecular-level dispersion of graphene into poly(vinyl alcohol) and effective reinforcement of their nanocomposites. *Adv Funct Mater*, 2009, 19(14): 2297–2302
- 148 Xu Y X, Hong W J, Bai H, et al. Strong and ductile poly(vinyl alcohol)/graphene oxide composite films with a layered structure. *Carbon*, 2009, 47(15): 3538–3543
- 149 Zhao X, Zhang Q H, Chen D J, et al. Enhanced mechanical properties of graphene-based poly(vinyl alcohol) composites. *Macromolecules*, 2010, 43(5): 2357–2363
- 150 Rafiee M A, Rafiee J, Wang Z, et al. Enhanced mechanical properties of nanocomposites at low graphene content. *ACS Nano*, 2009, 3(12): 3884–3890
- 151 Rafiee M A, Rafiee J, Srivastava I, et al. Fracture and fatigue in graphene nanocomposites. *Small*, 2010, 6(2): 179–183
- 152 Patra N, Wang B Y, Kral P. Nanodroplet activated and guided folding of graphene nanostructures. *Nano Letters*, 2009, 9(11): 3766–3771
- 153 Yuan Q Z, Zhao Y P. Precursor film in dynamic wetting, electrowetting, and electro-elasto-capillarity. *Phys Rev Lett*, 2010, 104(24): 246101
- 154 Behabtu N, Lomeda J R, Green M J, et al. Spontaneous high-concentration dispersions and liquid crystals of graphene. *Nature Nanotechnology*, 2010, 5(6): 406–411
- 155 Chang H X, Wang G F, Yang A, et al. A transparent, flexible, low-temperature, and solution-processible graphene composite electrode. *Adv Funct Mater*, 2010, 20(17): 2893–2902
- 156 Bunch J S, Verbridge S S, Alden J S, et al. Impermeable atomic membranes from graphene sheets. *Nano Letters*, 2008, 8(8): 2458–2462

# RESEARCH PROGRESS IN THE MECHANICAL PROPERTIES OF GRAPHENE\*

HAN Tongwei<sup>1</sup> HE Pengfei<sup>2,†</sup> LUO Ying<sup>1</sup> ZHANG Xiaoyan<sup>3</sup>

<sup>1</sup>School of Civil Engineering and Mechanics, Jiangsu University, Jiangsu Zhenjiang 212013, China

<sup>2</sup>School of Aerospace Engineering and Applied Mechanics, Tongji University, Shanghai 200092, China

<sup>3</sup>School of Chemistry and Chemical Engineering, Jiangsu University, Jiangsu Zhenjiang 212013, China

**Abstract** Graphene has attracted great interest in the fields of materials science and condensed-matter physics due to its unique 2D crystal structure and its exceptionally high crystal and electronic quality. In fact, this strictly 2D carbon material also exhibits exceptional mechanical properties-including high strength, high stiffness and structural perfection-which could be comparable to that of carbon nanotubes. Recently much effort has been dedicated to the understanding of mechanical behaviors and properties of graphene. However, predicting the mechanical properties of graphene, especially by experimental methods, is still a tough challenge because of its special and tiny structures. In this paper, we critically review recent advances in the study on mechanical properties of graphene from experimental investigation, numerical simulation and theoretical analysis, respectively. We focus on the following six aspects: (1) the experimental techniques and computational approaches most often used for studying the mechanical properties of graphene, (2) the roughness and intrinsic ripples in graphene, (3) the exploration of mechanical properties such as Young's modulus, tensile and compressive strengths and bending characteristics, (4) size, temperature and strain-rate dependent mechanical behavior of graphene under tension, (5) effect of atom-scale defects and doped atoms on the mechanical behavior of graphene, and (6) the application of graphene to nanocomposites and micro/nano electrical devices. Perspective is finally given for future development of mechanics analysis of graphene and graphene-based nanostructures.

**Keywords** graphene, mechanical properties, molecular dynamics, defects



贺鹏飞, 工学博士, 同济大学教授、博士研究生导师、科技处处长。中国力学学会复合材料力学专业委员会委员, 中国复合材料学会界面工程委员会委员, *Journal of Applied Mechanics*、《力学季刊》、*Multidiscipline Modeling in Materials and Structures* 和《应用力学学报》杂志编委。主要从事疲劳、损伤和破坏力学、材料微结构力学性能表征和优化的研究。主持和参加了多项国家自然科学基金重点、面上、上海市科技启明星、海军装备部等项目。

\* The project supported by the Scientific Research Foundation for Advanced Talents of Jiangsu University of China(10JDG034) and the Key Program of the Shanghai Committee of Science and Technology(09JC1414400)

† E-mail: ph232@tongji.edu.cn