

# 基于分子动力学的多晶石墨烯拉伸力学性能的 应变率相关性

刘春燕<sup>1</sup>, 李慧民<sup>1</sup>, 李东波<sup>2</sup>

(1. 西安建筑科技大学 土木工程学院, 陕西 西安 710055; 2. 西安建筑科技大学 理学院, 陕西 西安 710055)

**摘要:** 应变率是材料力学性能和变形机制的重要影响因素。利用维诺图理论, 创建了不同晶粒尺寸的多晶石墨烯模型; 利用分子动力学(MD)法, 研究了不同拉伸应变率下多晶石墨烯的弹性模量、拉伸强度、极限应变等与拉伸应变率之间的关系。结果表明, 多晶石墨烯的拉伸强度随拉伸应变率的增大而呈线性增大的趋势。对同一应变率而言, 拉伸强度随晶粒尺寸的增大而增大, 但对拉伸应变率的敏感度呈减小趋势。随拉伸应变率的增大, 弹性模量呈增大趋势, 但其受影响程度取决于应变率与阈值的关系。随着拉伸应变率的增大, 极限应变呈增大趋势。对同一应变率而言, 随晶粒尺寸的减小, 极限应变呈增大趋势。研究结果对明确拉伸应变率与多晶石墨烯拉伸力学性能之间的相关性具有一定的参考价值 and 意义。

**关键词:** 分子动力学; 多晶石墨烯; 力学性能; 拉伸应变率

中图分类号: TB332

文献标志码: A

文章编号: 1006-7930(2017)04-0604-07

## Effects of tensile strain rate on mechanical properties of polycrystalline graphene based on molecular dynamics

LIU Chunyan<sup>1</sup>, LI Huimin<sup>1</sup>, LI Dongbo<sup>2</sup>

(1. School of Civil Engineering, Xi'an Univ. of Arch. & Tech., Xi'an, 710055, China;

2. School of Science, Xi'an Univ. of Arch. & Tech., Xi'an, 710055, China)

**Abstract:** Strain rate is an important influence factor on the mechanical properties and deformation mechanism of materials. In the present paper, the polycrystalline graphene model of different grain size is built up using the theory of Voronoi diagram. Moreover, based on molecular dynamics (MD) numerical simulation, the effects of tensile strain rate on Young's elastic modulus, ultimate stress and ultimate strain are analyzed. The results indicate that, with the increase of tensile strain rate, tensile strength shows an increase trend. For the same strain rate, tensile strength increases with the increase of grain size, but the strain rate sensitivity shows a decrease trend. Elastic modulus increases with the increase of strain rate. However, the influence extent of strain rate on elastic modulus depends on the relationship between the strain rate and the threshold value. With the increase of tensile strain rate, ultimate strain shows an increase trend. For the same strain rate, tensile strength increases with the decrease of grain size. The research results can offer reference about the correlation between tensile strain rate and the tensile mechanical properties of polycrystalline graphene.

**Key words:** molecular dynamics; polycrystalline graphene; mechanical properties; tensile strain rate

石墨烯(Graphene)是一种由碳原子以  $sp^2$  杂化方式形成的蜂窝状平面薄膜, 是一种只有一个原子层厚度的准二维材料。由于其十分良好的强度、柔韧、导电、导热、光学特性, 在物理学、材料学、电子信息、计算机、航空航天等领域都得到了长足的发展<sup>[1]</sup>, 被誉为具有战略意义的新型纳米材料, 引起世界范围各领域的广泛关注。

而实现石墨烯工业化应用的前提和基础是大面积石墨烯的生产和合成。在目前众多合成石墨烯

的方法中, 化学气相沉积法(CVD)具有生产效率高、生长的石墨烯面积大等优点, 因此, 近年来被广泛使用和深入研究<sup>[2]</sup>, 逐渐成为生产石墨烯的主要方法。但是, 化学气相沉积技术主要利用碳原子在衬底表面上不同区域析出、形核、生长, 因此, 会致使各区域交界处形成晶界, 所以, 利用该方法生产的石墨烯含有较多晶界而成为多晶石墨烯。因此, 相比而言, 开展多晶石墨烯的研究对于石墨烯的工程应用具有重要的现实意义, 逐渐

成为该领域的研究热点。

实验研究方面, Huang 等<sup>[3]</sup>基于原子力显微镜(AFM)测试方法研究了晶界对石墨烯强度的影响,结果表明晶界使得多晶石墨烯的强度受到极大削弱. Ruiz-Vargas CS 等<sup>[4]</sup>对比分析了单晶石墨烯和多晶石墨烯的断裂强度,结果表明多晶石墨烯强度约为完美单晶石墨烯的 1/4. 数值模拟方面, Z. D. Sha 等<sup>[5]</sup>基于分子动力学方法对多晶石墨烯断裂对圆形缺口的敏感性进行研究,结果表明,多晶石墨烯的断裂对缺口的敏感性主要取决于圆形缺口的直径. Yi 等<sup>[6]</sup>研究含有单晶界时温度对多晶石墨烯力学性能的影响,结果表明随温度的升高,多晶石墨烯的力学性能呈降低趋势. M. Q. Chen 等<sup>[7]</sup>利用分子动力学方法研究了多晶石墨烯拉伸力学性能与温度、拉伸应变率以及晶粒平均尺寸之间的关系. 李东波等<sup>[8]</sup>利用分子动力学方法和正交试验理论研究了多晶石墨烯拉伸力学性能对晶粒尺寸、温度和拉伸应变率的敏感程度.

虽然目前有关多晶石墨烯的研究日益受到关注,但由于建模方法、测试形式等的不同,使得现有研究结果具有较大差异,无法形成共识性认识. 如 Mortazavi 等<sup>[9]</sup>研究表明,随晶粒平均尺寸的增大,多晶石墨烯的断裂强度呈增大趋势;但 Song 等<sup>[10]</sup>的研究结果却与此相反,即随着晶粒平均尺寸的增大,多晶石墨烯的断裂强度呈减小趋势.

应变率是表征材料变形速度的一种度量. 研究表明,应变率对材料的力学性能和变形机制有着重要的影响<sup>[10-11]</sup>. 本文利用分子动力学(MD)方法,对拉伸应变率与多晶石墨烯拉伸力学性能间的关系进行系统分析. 研究了室温下(300 K)拉伸应变率为  $0.000\ 5\ \text{ps}^{-1}$ 、 $0.001\ \text{ps}^{-1}$ 、 $0.005\ \text{ps}^{-1}$ 、 $0.01\ \text{ps}^{-1}$ 、 $0.05\ \text{ps}^{-1}$  时杨氏弹性模量、拉伸强度和极限应变等与拉伸应变率之间的关系.

## 1 数值建模方法

### 1.1 多晶石墨烯的数值建模方法

本文基于维诺图(Voronoi diagram)理论<sup>[13]</sup>建立多晶石墨烯的原子结构模型. 首先,利用随机设置的  $n$  个离散点  $P = \{p_1, p_2, \dots, p_n\}$  将平面分为  $n$  个区域  $V(p_i)$ . 根据维诺图理论,每个区域  $V(p_i)$  是到点  $p_i$  距离最近点的集合,以此对应于一个晶粒,晶粒尺寸可通过设定维诺图中离散点  $n$  的个数来调节区域  $V(p_i)$  大小进行调节. 然后,在各个晶粒区域按照随机的晶体取向进行石墨烯碳原子的填充,由于晶体取向的随机性会造成晶格失配,从而在相邻晶粒之间会形成晶界<sup>[14]</sup>,最终建立含有多个随机晶界的多晶石墨烯模型.

根据以上理论,本文创建了不同平均晶粒尺寸(5 nm、7.5 nm 和 10 nm)的多晶石墨烯模型,模型尺寸为  $30 \times 30\ \text{nm}$ ,共含 35 200 个碳原子,各多晶石墨烯原子构型图如图 1(a)~(c)所示.

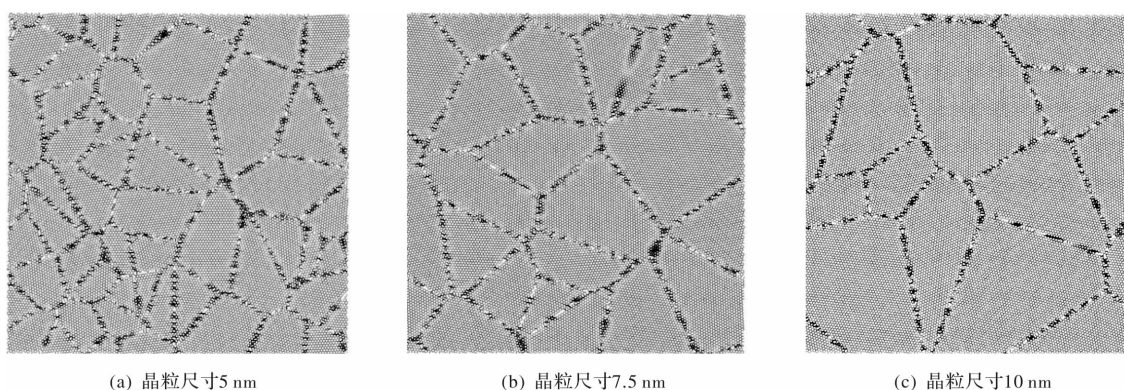


图1 不同晶粒尺寸的多晶石墨烯原子结构模型

Fig. 1 Atomic structure model of polycrystalline graphene with different grain size

### 1.2 数值模拟方法

根据上文所述方法创建的多晶石墨烯模型中由于各晶粒中晶向的随机性,会造成模型晶界处碳原子密度分布出现较大差异,因此,为满足能量最小化原理,使得所建模型更加稳定,拉伸模拟前,首先将模型在 3 000 K 高温下进行充分弛豫(50 ps),从而使晶界处原子重分布,以此获得较

稳定的多晶石墨烯模型,如图 2 所示. 由图可见,由于各晶粒晶向的随机性,稳定的多晶石墨烯晶界处会存在多种原子缺陷,如五元环、七元环以及含有多个空位缺陷的多元环等.

利用大规模原子分子并行模拟软件 LAMMPS 对稳定的多晶石墨烯进行拉伸模拟. 碳原子间相互作用选用目前常用的 AIREBO 势函数<sup>[15]</sup>进行描

述, AIREBO 势能函数表达式为

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

其中:  $E_{ij}^{\text{REBO}}$  为键序势能;  $E_{ij}^{\text{LJ}}$  为长程相互作用势能;  $E_{ijkl}^{\text{TORSION}}$  为四体扭转势能. 一般而言, AIREBO 势函数的转换函数参数默认值介于 1.7 ~

2.0 Å 之间, 但根据文献[7-10]的研究结果, 当用该势函数进行石墨烯、碳纳米管等碳基材料的拉伸模拟而使得 C-C 键键长超过 1.7 Å 时, 会出现不符合物理常识的断裂应力升高现象. 因此, 本文在拉伸模拟时将 AIREBO 势函数中的转换函数参数设为 2.0 Å, 以避免该现象的发生.

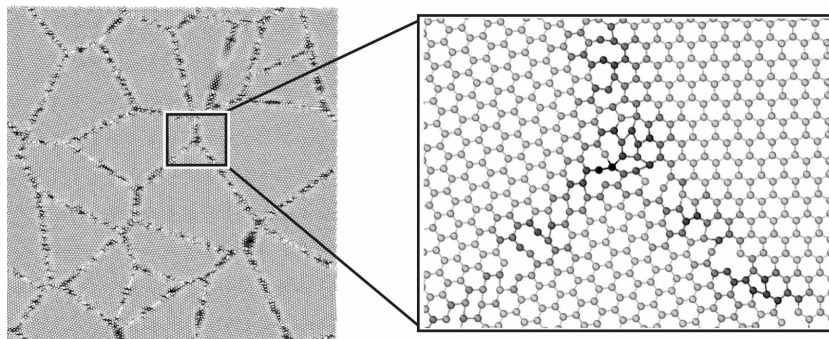


图2 多晶石墨烯模型及晶界原子构型放大图

Fig. 2 Model of polycrystalline graphene and zoom view of grain boundary

拉伸数值模型中, 石墨烯在两个面内方向( $x$ 、 $y$ )均设为周期性边界条件; 时间步长设为 1 fs. 拉伸前, 首先在恒温恒压(NPT)系综下将模型弛豫 10 ps, 然后在正则系综(NVT)下, 对模型两端固定的碳原子施加均匀拉伸应变, 并在加载后弛豫 1 ps; 重复此拉伸、弛豫过程, 直至断裂<sup>[16]</sup>.

## 2 模拟结果分析

### 2.1 拉伸断裂过程分析

根据上文所建模型, 本文首先模拟了晶粒平均尺寸为 7.5 nm 的多晶石墨烯的拉伸断裂过程, 模拟温度和拉伸应变率分别为 300 K 和  $0.001 \text{ ps}^{-1}$ , 图 3 即为多晶石墨烯拉伸变形及断裂过程.

由图 3(a)可见, 加载前晶粒内应力分布较均匀, 但在晶界处由于原子晶格的失配, 致使应力分布明显不均. 图 3(b)为当拉伸应变达到 0.05 时的原子构型图, 相比图 3(a)整个模型上的平均应力明显增大, 并且在晶界交界处裂纹开始形核. 随着荷载的进一步增大, 裂纹逐渐形成并沿着晶界逐渐扩展, 如图 3(c)~(d). 随着继续加载使得拉伸应变达到 0.063 时, 裂纹将进一步扩展并最终穿越晶粒直至贯通, 从而导致石墨烯的最终断裂, 且最终的开裂方向基本与拉伸方向垂直, 如图 3(e)~(f).

拉伸断裂过程说明, 多晶石墨烯由于晶界处原子晶格失配, 会形成大量的原子缺陷, 尤其在多个晶界交界处, 形成大量的五元环、七元环以

及含有多个空位缺陷的多元环等, 这些缺陷的存在使得该区域内应力明显不均, 且含有空位缺陷的多元环处原子键合能较低, 极易在外荷载作用下发生扩展, 造成石墨烯的断裂, 从而使得多晶石墨烯的抗拉能力得到削弱.

### 2.2 应力-应变曲线分析

图 4(a)~(c)分别为晶粒尺寸为 5 nm、7.5 nm 和 10 nm 的多晶石墨烯在不同拉伸应变率下的应力-应变曲线.

由图可见, 在恒温(300 K)条件下, 多晶石墨烯的拉伸力学性能表现出较强的应变率相关性. 已有研究<sup>[17]</sup>表明, 单晶石墨烯的拉伸应力-应变曲线呈现出明显的强化阶段, 与此不同, 从拉伸开始至完全断裂, 多晶石墨烯曲线未出现明显强化阶段.

另一方面, 从开始拉伸至极限拉伸应力阶段, 不同晶粒尺寸石墨烯的应力-应变曲线变化差异较小. 从极限应力至完全断裂阶段, 曲线变化差异较大. 当拉伸应变率为  $0.0005 \text{ ps}^{-1}$ 、 $0.001 \text{ ps}^{-1}$ 、 $0.005 \text{ ps}^{-1}$  等较小值时, 拉伸应力一旦超过极限强度后, 石墨烯抗拉能力急剧降低至零(完全断裂). 而当应变率继续增大至  $0.01 \text{ ps}^{-1}$  和  $0.05 \text{ ps}^{-1}$  时, 当拉伸应力超过极限应力后, 石墨烯抗拉能力降低速度变缓, 即从极限应力降为零还需经过较大的拉伸变形, 如应变率为  $0.05 \text{ ps}^{-1}$  时, 拉伸应变从 0.08 增至将近 0.14 时, 其拉伸强度才降为零(完全断裂).

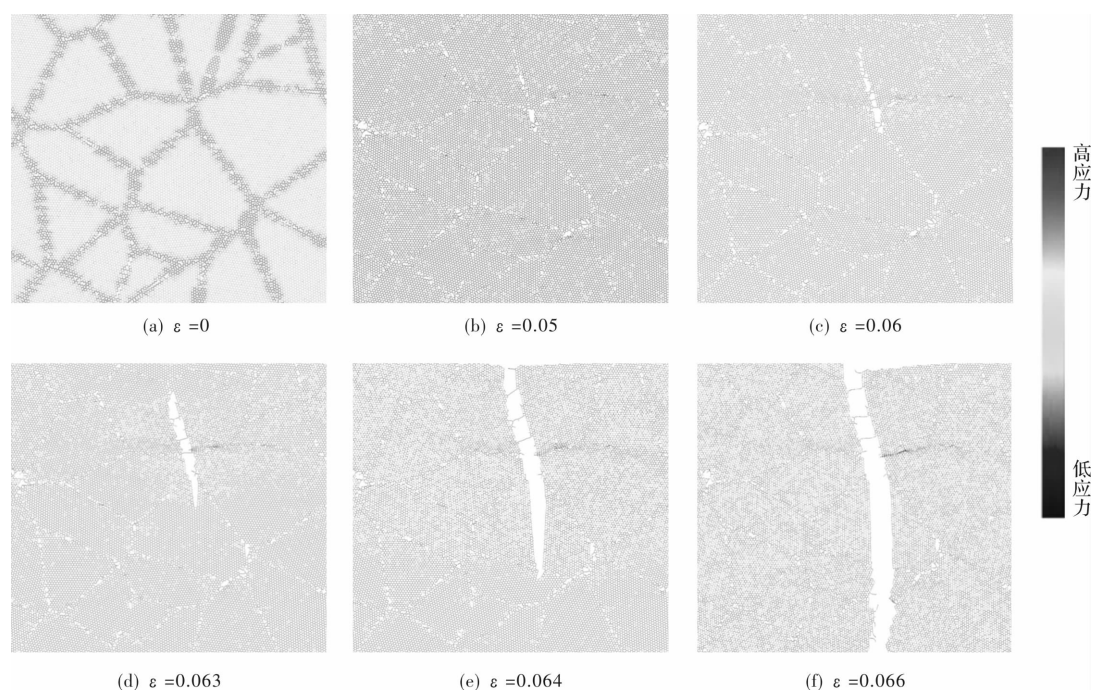


图3 多晶石墨烯拉伸断裂过程图

Fig. 3 Atomic configuration of crack nucleation and propagation of polycrystalline graphene under uniaxial tension

分析认为, 这是因为当拉伸应变率较低时, 加载速度较慢, 石墨烯碳原子有较长的时间来重分布各自位置来耗散拉伸变形能, 均匀地分散外力所做的功, 使得整个模型趋于平衡状态, 更接近于准静态拉伸变形. 随着拉伸应变率的增大, 连续加载时间间隔缩短, 石墨烯碳原子在较短时间内无法通过位置重分布来耗散外力所做的功, 整个拉伸过程无法达到平衡状态, 加载过程近乎动态加载<sup>[18]</sup>, 且应变率越大, 这种动态加载效应愈明显, 整个体系的非平衡状态愈强, 造成在整个体系上应力分布不均, 局部出现应力集中现象, 早于其他部分达到拉伸极限强度, 形成局部开裂, 此时其他应力较低部位尚未达到抗拉极限, 因此, 整个模型不会马上发生断裂, 而是需要经历一定的拉伸变形, 待各处局部裂纹扩展、贯通后才逐渐失去抗拉能力, 最终完全断裂.

### 2.3 弹性模量分析

由于多晶石墨烯中晶界的存在会使得弛豫后石墨烯褶皱程度更大, 因此在最初拉伸阶段, 应力-应变之间的非线性关系更加明显. 因此, 首先利用最小二乘法对图4应力-应变曲线中应变在0.02~0.04段部分进行线性拟合<sup>[19]</sup>, 从而得到 $x$ 和 $y$ 两个方向的弹性模量; 然后对两个方向的弹性模量求算数平均值得到整个模型的平均弹性模量.

图5为弹性模量随拉伸应变率变化曲线图. 由图可见, 不同晶粒尺寸的多晶石墨烯的弹性模量均随应变率增大而增大. 且以应变率 $0.005 \text{ ps}^{-1}$ 为界, 当应变率低于该值时, 曲线较为平缓, 斜率较小, 说明弹性模量受应变率变化影响较小; 当应变率超过该值时, 曲线斜率急剧增大, 曲线变得陡直, 说明弹性模量受应变率变化影响加剧. 这说明弹性模量受拉伸应变率的影响程度与拉伸应变率阈值 $\dot{\epsilon}_{th}$  (本文为 $0.005 \text{ ps}^{-1}$ )有关, 当应变率低于阈值 $\dot{\epsilon}_{th}$ 时, 其对弹性模量的影响较小, 当高于阈值 $\dot{\epsilon}_{th}$ 时, 其对弹性模量影响程度明显增大.

分析认为, 因为弹性模量的本质是原子间的键合能, 当应变率较低时, 整个过程更接近于准静态加载, 整个体系能量分布较均匀, 个体原子的能量差异较小, 每个原子达到甚至超过其能量阈值的时间和机会相当, 从而使弹性模量变化不大. 当应变率较大时, 动态加载效应开始增大, 单位时间外荷载所做的功增大, 而整个体系用来均匀耗散外荷载所做功的时间却减小, 因此能量无法在整个体系内均匀分布, 造成个体原子的能量差异较大, 每个原子达到甚至超过其能量阈值的时间和机会不等, 从而造成弹性模量的较大差异.

### 2.4 抗拉强度分析

图6为不同晶粒尺寸多晶石墨烯抗拉强度与拉伸应变率关系曲线图. 由图可见, 随晶粒尺寸增

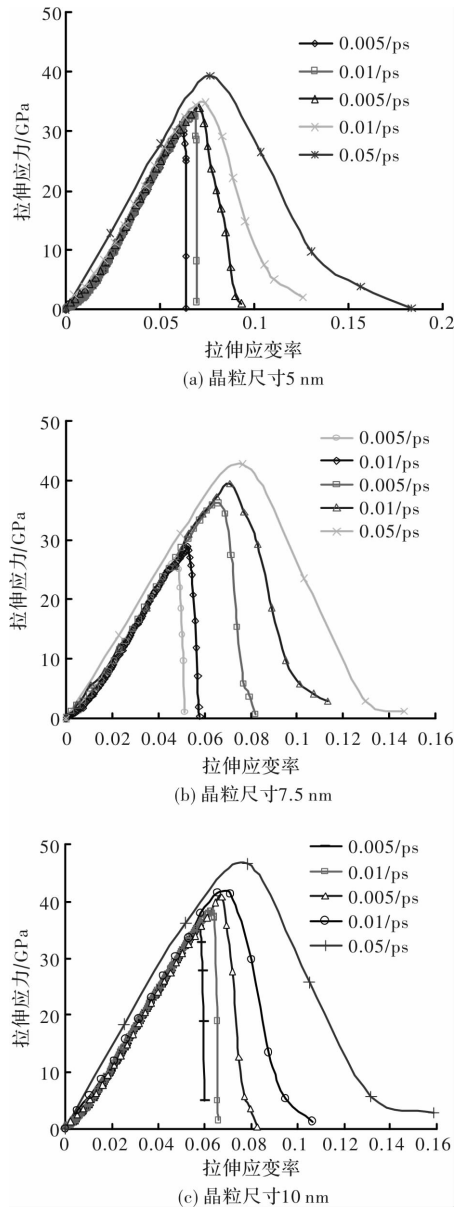


图4 多晶石墨烯在不同拉伸应变率下的拉伸应力-应变曲线图

Fig. 4 Stress-strain curves of polycrystalline under different tensile strain rate

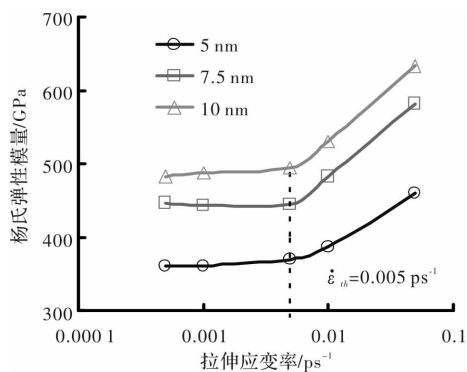


图5 杨氏弹性模量与拉伸应变率关系曲线图

Fig. 5 Curves of Young's elastic modulus of polycrystalline graphene changing with the tensile strain rate

大, 多晶石墨烯的拉伸强度程增大趋势. 这是由于

随着晶粒尺寸的减小, 单位面积上的晶界数量越多, 而晶界处存在较多的原子缺陷, 随着外荷载的不断增大, 更易发生扩展, 从而削弱多晶石墨烯的抗拉强度.

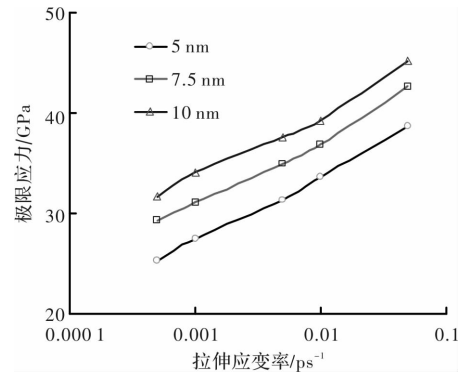


图6 拉伸强度随拉伸应变率变化曲线图

Fig. 6 Curves of tensile strength of polycrystalline graphene changing with the tensile strain rate

此外, 根据图6可见, 随拉伸应变率的增大, 对于不同晶粒尺寸的多晶石墨烯而言, 其拉伸强度均近乎呈线性增大. 即对不同晶粒尺寸的多晶石墨烯, 其拉伸强度与拉伸应变率间关系应满足<sup>[20]</sup>:

$$\sigma = A \dot{\epsilon}^m \quad (2)$$

式中:  $\sigma$  为材料的拉伸强度;  $A$  为与材料有关的常数;  $\dot{\epsilon}$  为拉伸时的应变率;  $m$  为应变率敏感系数.

因此, 为进一步分析多晶石墨烯拉伸强度对拉伸应变率的敏感程度, 应根据方程(2)得到  $m$  的显式表达式, 为此, 对方程(2)的两端取自然对数, 可得:

$$\ln(\sigma) = \ln A + m \ln(\dot{\epsilon}) \quad (3)$$

进一步对方程(3)两端求导数并整理可得:

$$m = \frac{\partial \ln(\sigma)}{\partial \ln(\dot{\epsilon})} \quad (4)$$

由方程(4)可知, 灵敏度系数  $m$  可通过求  $\ln(\sigma) - \ln(\dot{\epsilon})$  曲线的斜率得到. 由此可进一步得到多晶石墨烯拉伸强度对拉伸应变率敏感性趋势线图, 如图7所示.

由图7可见, 晶粒平均尺寸分别为 5 nm、7.5 nm 和 10 nm 时, 多晶石墨烯拉伸强度对拉伸应变率的敏感系数分别为 0.090 6、0.080 1 和 0.073 8, 说明拉伸强度对应变率的敏感度随晶粒尺寸的增大而减小. 分析认为, 晶粒尺寸越大, 单位面积上的晶界数量会越少, 使得单位面积上的原子缺陷减少, 整个体系结构越接近完美状态, 从而内禀性能也更加稳定, 使得其受外界因素的影响程度减小.

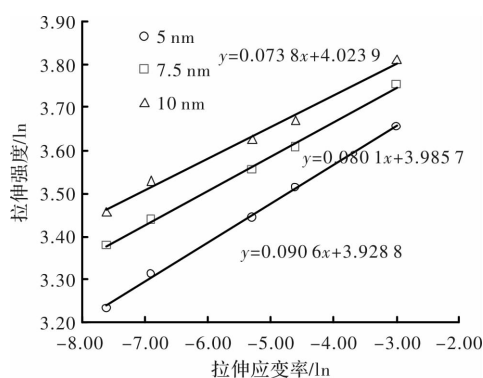


图7 不同晶粒尺寸多晶石墨烯拉伸强度对拉伸应变率敏感性趋势线图

Fig. 7 Sensitivity trend line of different grain sizes of polycrystalline graphene to tensile strain rate

## 2.5 极限拉伸应变分析

图8为极限拉伸应变随拉伸应变率变化曲线图,由图可见,对不同晶粒尺寸的多晶石墨烯而言,其极限拉伸应变均随应变率的增大而呈增大趋势.且与弹性模量变化相似,极限应变受应变率影响程度也呈现一定的“阈值性”.即当应变率小于阈值(本文为 $0.005 \text{ ps}^{-1}$ )时,极限拉伸应变随应变率变化程度不大,曲线较为平缓,斜率较小;当应变率超过阈值时,极限拉伸应变随应变率变化程度加剧,曲线变得陡直,也即斜率急剧增大,说明拉伸应变率对极限拉伸应变的影响程度明显增大.

此外,由图可见,极限拉伸应变随晶粒尺寸的减小呈增大趋势.分析认为,稳定的石墨烯呈现褶皱状,对于多晶石墨烯而言,随晶粒尺寸的减小,晶界数量增多,致使弛豫后稳定的多晶石墨烯的褶皱程度增大,在拉伸时需要较大的拉伸变形才能消除这一效应,从而使得极限拉伸应变增大.

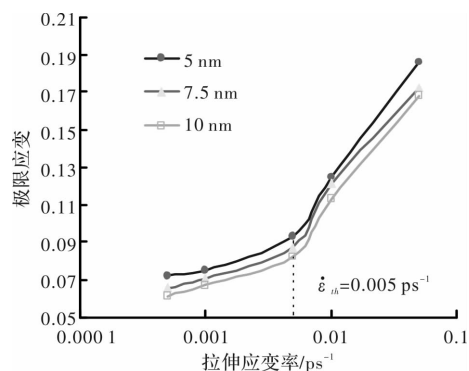


图8 极限拉伸应变随拉伸应变率变化曲线图

Fig. 8 Curves of ultimate stress of polycrystalline graphene changing with the tensile strain rate

## 3 结论

本文基于分子动力学(MD)方法,研究分析了拉伸应变率对不同晶粒尺寸多晶石墨烯的杨氏弹性模量、拉伸强度、极限应变等的影响,主要结论有:

(1)随着拉伸应变率的增大,多晶石墨烯的拉伸强度呈线性增大趋势.随晶粒尺寸增大,拉伸强度呈增大趋势,但对拉伸应变率的敏感度呈减小趋势.

(2)随着拉伸应变率的增大,弹性模量呈增大趋势.且当应变率低于 $0.005 \text{ ps}^{-1}$ 时,弹性模量受应变率变化影响较小;当应变率超过 $0.005 \text{ ps}^{-1}$ 时,弹性模量受应变率变化影响加剧.

(3)随着拉伸应变率的增大,极限拉伸应变呈增大趋势.且随着晶粒尺寸的减小,极限拉伸应变也呈增大趋势.

## 参考文献 References

- [1] BRINK Van Den J. Graphene: from strength to strength [J]. Nature Nanotechnology, 2007, 2(4): 199-201.
- [2] 王璐,高峻峰,丁峰. 经典晶体生长理论在石墨烯CVD成核和连续生长中的应用[J]. 化学学报, 2014, 72(3): 345-358.  
WANG Lu, GAO Junfeng, DING Feng. Application of crystal growth theory in graphene CVD nucleation and growth [J]. Acta Chimica Sinica, 2014, 72(3): 345-358.
- [3] HUANG P Y, RUIZ-VARGAS C S, ZANDE Van Der A M, Whitney WS, et al. Grains and grain boundaries in single-layer graphene atomic patchwork quilts [J]. Nature, 2011, 469: 389-92.
- [4] RUIZ-VARGAS C S, ZHUANG H L, HUANG P Y, et al. Softened elastic response and unzipping in chemical vapor deposition graphene membranes [J]. Nano Lett, 2011, 11(6): 2259-63.
- [5] SHA Z D, PEI Q X, LIU Z S, et al. Is the failure of large-area polycrystalline graphene notch sensitive or insensitive [J]. Carbon, 2014, 72: 200-206.
- [6] YI L, YIN Z, ZHANG Y, CHANG T. A theoretical evaluation of the temperature and strain-rate dependent fracture strength of tilt grain boundaries in graphene [J]. Carbon, 2013, 51: 373-80.
- [7] CHEN M Q, QUEK S S, SHA Z D, et al. Effects of grain size, temperature and strain rate on the mechanical properties of polycrystalline graphene - A molecular dynamics study [J]. Carbon, 2015, 85: 135-146.
- [8] 李东波,赵冬,华军. 多晶石墨烯拉伸力学性能及其影响因素的灵敏度分析 [J]. 固体力学学报, 2016, 37(3): 234-246.  
LI Dongbo, ZHAO Dong, HUA Jun. Tensile mechanical properties and influence factor sensitivity analysis of polycrystalline graphene. Chinese journal of solid mechanics, 2016, 37(3): 234-246.
- [9] MORTAZAVI B, CUNIBERTI G. Atomistic modeling of mechanical properties of polycrystalline graphene [J]. Nanotechnology, 2014, 25(21): 215-222.

- [10] SONG Z, ARTYUKHOV V I, YAKOBSON B I, XU Z. Pseudo hall-petch strength reduction in polycrystalline graphene [J]. Nano Lett, 2013, 13(4): 1829-33.
- [11] LEE W S, LIN C F. Impact properties and microstructure evolution of 304L stainless steel[J]. Mat Sci Eng A, 2001, 308(1/2): 124-135.
- [12] MEYERS M A. Dynamics Behavior of Materials[M]. New York: John Wiley & Sons Inc, 1994.
- [13] BROSTOW W, DUSSAULT J P, FOX B L. Construction of voronoi polyhedra[J]. J Comput Phys, 1978, 29(1): 81-92.
- [14] 张俊杰. 基于分子动力学的晶体铜纳米机械加工表层形成机理研究[D]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学, 2011. ZHANG Junjie. Molecular dynamics study of generation mechanism of surface layer in nanomechanical machining of crystalline copper [D]. Harbin: Harbin Institute of Technology, 2011.
- [15] STUART S J, TUTEIN A B, HARRISON J A. A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions[J]. J Chem Phys, 2000, 112(14): 6472-86.
- [16] 李东波, 赵冬, 华军. 碳原子辐照损伤后石墨烯拉伸力学性能的温度相关性[J]. 西安建筑科技大学学报(自然科学版), 2016, 48(3): 454-458. LI Dongbo, ZHAO Dong, HUA Jun. Research on correlation of tensile mechanical properties of irradiated graphene by C atoms with temperature [J]. J. Xi'an Univ. of Arch. & Tech. (Natural Science Edition), 2016, 48(3): 454-458.
- [17] 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[J]. 新型碳材料, 2010, 25(4): 261-266. HAN Tongwei, HE Pengfei, WANG Jian, et al. Molecular dynamics simulation of a single graphene sheet under tension[J]. New carbon materials, 2010, 25(4): 261-266.
- [18] 张宁, 杨新华, 陈传尧. 纳米双晶铜单向拉伸弹性性能的应变率效应和尺寸效应[J]. 固体力学学报, 2009, 30(3): 231-235. ZHANG Ning, YANG Xinhua, CHEN Chuanyao. Effect of strain rate and size on the mechanical properties of nano-bi-crystal Cu under uni-axial tension[J]. Chinese journal of solid mechanics, 2009, 30(3): 231-235.
- [19] 韩强, 黄凌燕. 石墨烯薄膜拉伸性能的分子动力学模拟[J]. 华南理工大学学报, 2012, 40(2): 29-34. HAN Qiang, HUANG Ling-yan. Molecular dynamics simulation of tensile properties of graphene sheets[J]. Journal of South China University of Technology, 2012, 40(2): 29-34.
- [20] SHOHJI Ikuo, YOSHIDA Tomohiro, TAKAHASHI Takehiko, et al. Tensile properties of Sn-Ag based lead-free solders and strain rate sensitivity[J]. Materials Science and Engineering A, 2004, 366(1): 50-55.

(编辑 桂智刚)

(上接第 591 页)

- [12] 王智波, 李长洪. 轻资产运营对企业利润率的影响: 基于中国工业企业数据的实证研究[J]. 中国工业经济, 2015(6): 108-121. WANG Zhibo, LI Changhong. Effects of light assets operation on enterprise profit margin: an empirical study based on data of chinese industrial enterprises [J]. China Industrial Economy, 2015(6): 108-121.
- [13] 郭连强, 刘力臻, 祝国平. 我国房地产金融创新面临的突出问题与对策[J]. 经济纵横, 2015(3): 103-108. GUO Lianqiang, LIU Lizhen, ZHU Guo-ping. Study on the problems and countermeasures of real estate financial innovation in China [J]. Acta Synchronicism, 2015(3): 103-108.
- [14] 谢思聿. 万达地产变“轻”[J]. 中国企业家, 2015(5): 49-51. XIE Siyu. Wanda real estate becomes “light” [J]. Chinese Entrepreneurs, 2015(5): 49-51.
- [15] 李玉. 我国商业地产转型轻资产运营模式的研究[D]. 北京: 北京交通大学, 2015. LI Yu. Study on the operation model of China's commercial real estate transformation light assets [D]. Beijing Jiaotong University, 2015.
- [16] 王妍. 银行与房地产开发企业的动态博弈分析[J]. 系统工程, 2010(12): 52-55. WANG Yan. Dynamic game analysis of banks and real estate development enterprises [J]. Journal of Systems Engineering, 2010(12): 52-55.
- [17] 谭玲. 产业投资基金的博弈分析: 基于基金管理人与被投资企业双方[J]. 生产力研究, 2009(6): 72-74. TAN Ling. Game analysis of industrial investment funds: based on fund managers and invested companies [J]. Productivity Research, 2009(6): 72-74.
- [18] 张跃文, 杜晓琳. 创业企业投资者关系管理: 个嵌入投资者保护机制的博弈模型[J]. 中国社会科学院研究生院学报, 2015(1): 59-64. ZHANG Yuwen, DU Xiaolin. Participation model of investor relations in entrepreneurial enterprises: a game model of embedded mechanism of investors [J]. Journal of Chinese Academy of Social Sciences Journal of Graduate School of Chinese Academy of Social Sciences, 2015(1): 59-64.
- [19] 卢珊, 赵黎明. 基于协同理论的创业投资机构与科技型中小企业演化博弈分析[J]. 科学学与科学技术管理, 2011(7): 120-123, 179. LU Shan, ZHAO Liming. Evaluation of entrepreneurial investment institutions and small and medium-sized enterprises based on cooperative theory [J]. Science and Science and Technology Management, 2011(7): 120-123, 179.
- [20] 肖伟, 张汉江, 秦国文. 资金供应链管理中的企业投融资博弈分析[J]. 系统工程, 2005(10): 86-91. XIAO Wei, ZHANG Hanjiang, QIN Guowen. Study on Game Analysis of Enterprise Investment and Financing in Capital Supply Chain Management [J]. Journal of Systems Engineering, 2005(10): 86-91.
- [21] 王丽萍. 非对称企业间环境技术创新的复制动态和演化稳定策略[J]. 工业技术经济, 2013(5): 92-95. WANG Liping. Modification dynamics and evolution stabilization strategy of environmental technology innovation among asymmetric enterprises [J]. Industrial Technology Economy, 2013(5): 92-95.
- [22] FRIEDMAN D. Evolutionary game in economics[J]. Econometrica, 1997, 59(3): 637-666.

(编辑 桂智刚)