

# 含裂纹石墨烯辐照修复研究

华军, 陈垣欣, 段志荣, 候燕

(西安建筑科技大学 理学院, 陕西 西安 710055)

**摘要:** 实际中生产出来的石墨烯不可避免的存在缺陷, 缺陷对其优异的力学性能有着不可忽视的影响。利用分子动力学方法建立了 C 离子辐照含裂纹石墨烯的数值模型, 先对含裂纹石墨烯进行辐照模拟, 验证了辐照修复的可行性, 分析了其修复原理, 研究了辐照剂量和辐照能量对辐照效果的影响。通过拉伸模拟, 将其力学性能与辐照前、完美石墨烯的进行比较, 并对辐照后石墨烯在不同温度( $0\sim 1000$  K)下进行了拉伸。结果表明: 通过合理的控制辐照因素, 可以用辐照手段实现对石墨烯裂纹的修复, 从而提高其力学性能。辐照剂量和辐照能量影响着辐照效果。温度对辐照修复后石墨烯的力学性能也有较大的影响, 随着温度的升高, 其拉伸强度和拉伸极限应变近似线性降低。

**关键词:** 石墨烯; 裂纹; 辐照修复; 分子动力学; 力学性能; 温度相关性

中图分类号: TB332

文献标志码: A

文章编号: 1006-7930(2018)01-0141-07

## Repairing of the graphene with a crack by carbon ion irradiation

HUA Jun, CHEN Yuanxin, DUAN Zhirong, HOU Yan

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

**Abstract:** There exist inevitable defects in the production of graphene, which can affect its excellent mechanical properties. The molecular dynamics model of graphene with a pre-crack irradiated by carbon neutral and the tensile model after irradiation are established. The simulation results show that the reparation by irradiation is feasible and the mechanism of reparation is analyzed. The influences of the dose and energy on the irradiation are investigated. After irradiation, the tensile properties are also investigated and compared with that of pristine graphene and graphene with the crack. The tensile properties of graphene after reparation are also studied at different temperatures ( $0\sim 1000$  K). The simulation results showed that irradiation can be used to repair the crack in graphene and improve its mechanical properties. Both the dose and energy of irradiation have important influence on the reparation. And the temperature has a great influence on the mechanical properties of the irradiated graphene. With the increase of temperature, the tensile strength and limit stain decrease linearly.

**Key words:** graphene; crack; irradiation repair; molecular dynamics; mechanical property; temperature Dependence

完美石墨烯是一种理想结构, 具有独特的二维结构和优异的力学、电学、光学、热学等性能<sup>[1-4]</sup>。在石墨烯的制备过程中, 不可避免的产生缺陷, 研究表明缺陷对完美石墨烯的力学性能以及拉伸破坏机理都有很大影响<sup>[5-6]</sup>, 因此, 通过修复来提升含缺陷石墨烯性能是十分有益的。对于修复方法, 主要有自修复法、高温修复法、吸附修复法和金属辅助修复法几种<sup>[7]</sup>。辐照是一种利用运动粒子的辐射去改变分子结构的化工技术, 工业上, 通过辐照, 使高分子材料之间的长线形大分子之间通过一定形式的化学键连接形成网状结构, 它可以使高分子之间的束缚力大大增强, 进而增强材料的化学稳定性、强度、耐应力开裂等。在软件模拟中具体是指将被辐照材料作为靶原子,

通过入射粒子对其撞击从而达到某种结果的过程<sup>[8]</sup>。研究表明, 当入射粒子能量较大时, 能穿透被辐照材料, 使得靶原子溅射而产生缺陷; 当入射粒子能量较小时, 入射粒子滞留在靶原子的周围, 产生吸附作用或与靶原子成键<sup>[9]</sup>。Xin 等<sup>[10]</sup>通过对速度的控制使得入射粒子停留在石墨烯薄膜层与层之间, 并形成键的作用, 实现了石墨烯薄膜层的连接。丁怀燕等<sup>[11]</sup>采用紫外辐照的方法, 利用 Ag 颗粒对缺陷定量标记, 结果表明该方法能提供石墨烯表面缺陷的数量和分布信息, 另外 Ag 纳米颗粒对石墨烯缺陷有修复作用, 可以提高石墨烯的导电能力。张科举等<sup>[12]</sup>利用低能 N<sup>+</sup>离子束对氧化石墨烯进行辐照, 研究发现氧化石墨烯表面发生原子迁移、重排, 离子束辐照减少了氧

化石墨烯表面缺陷，具有明显的改性效果。

温度是影响材料稳定性和力学性能的一个重要因素，已经有不少学者对石墨烯在不同温度下进行了各个方面研究。黄凌燕等<sup>[13]</sup>进行了单层石墨烯温度效应的分子动力学模拟，得出单层石墨烯的弛豫性能和拉伸性能均对温度有很强的依赖性。黄键彰等<sup>[14]</sup>研究了温度对石墨烯褶皱变形的影响，得出温度会对石墨烯褶皱产生重要的影响。熊立婷等<sup>[15]</sup>研究了温度对石墨烯条带拉伸力学性能影响的模拟，得出石墨烯条带拉伸强度随着温度的升高而减小，且温度变化速率对拉伸强度也有影响。由此可见，对辐照修复后的石墨烯拉伸力学性能的温度相关性进行研究是有必要的。

本文利用辐照吸附/成键这一特性，探讨通过合理的控制入射粒子的能量、剂量等因素，从而达到修复缺陷，提高缺陷材料力学性能的目的。利用分子动力学方法建立了碳原子辐照含裂纹石墨烯的数值模型，通过比较分析了辐照修复石墨烯裂纹缺陷的可行性，以及辐照能量和辐照剂量对辐照效果的影响，并对辐照修复后石墨烯的拉伸性能和及温度相关性进行了研究。

## 1 数值模拟方法

石墨烯大小为  $11.08 \text{ nm} \times 11.07 \text{ nm}$ ，厚度为  $0.335 \text{ nm}$ ，包含 4 680 个碳原子。为研究辐照对含裂纹石墨烯力学性能的影响，在完美石墨烯中心预制了一条水平裂纹，其大小为  $1 \text{ nm} \times 0.4 \text{ nm}$ ，如图 1 所示。本文选用 C 原子作为入射粒子，辐照时入射粒子位于石墨烯裂纹正上方一定高度，垂直随机入射到石墨烯表面，所建辐照模型如图 2 所示。模拟采用 Sandia 国家实验室开发的软件 LAMMPS 进行分子动力学计算，选取 AIREBO 势函数描述石墨烯 C-C 键和入射粒子与靶原子之间的相互作用。研究表明，该势函数能很好的描述碳碳键的相互作用<sup>[16-17]</sup>。

模拟过程中，首先对石墨烯模型进行充分的弛豫，使其达到能量平衡状态。弛豫完成后，将石墨烯模型左右两端两列碳环固定，在  $x$  和  $y$  方向采用自由边界条件， $z$  方向采用周期性边界条件。碳粒子随机分布在石墨烯裂纹正上方  $4.2 \text{ nm}$  的位置，这是因为靶原子与入射粒子距离大于  $4 \text{ nm}$  时，靶原子与入射粒子之间的作用可忽略<sup>[10]</sup>。每入射完一个碳原子，将模型弛豫  $10 \text{ ps}$  使其温度恢复至  $300 \text{ K}$ ，然后再进行下一个碳原子的入射，直到完成所设定的辐照剂量。

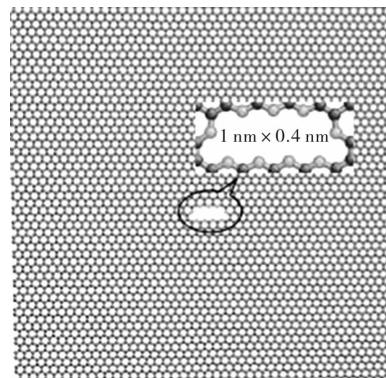


图 1 含裂纹石墨烯模型示意图  
Fig. 1 Sketch map of graphene with a crack

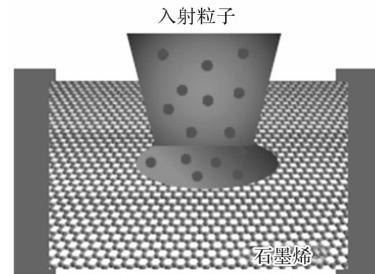


图 2 C 离子入射示意图  
Fig. 2 Sketch map of Carbon ions irradiating graphene

为研究辐照修复效果，本文建立了辐照后石墨烯拉伸数值模型，如图 3 所示。模拟中，选用 AIREBO 势函数描述系统碳原子间的相互作用，C 原子质量为  $12.01$  原子质量单位（ $1$  原子质量单位  $= 1.660\ 540\ 2 \times 10^{-27} \text{ kg}$ ），时间步长取  $1 \text{ fs}$ ， $x$ 、 $y$  方向为自由边界条件， $z$  方向为周期性边界条件<sup>[5]</sup>，采用 Nose-Hoover<sup>[18-20]</sup>等温调节法，控制系统温度为  $300 \text{ K}$ 。拉伸过程中，首先对辐照后的原子构型进行充分的弛豫，然后在 NVT 系综下，将模型下端两行碳环固定，对上端原子施加  $y$  方向的拉伸应变荷载，每次应变增量为  $0.001$ ，弛豫步数取为  $5\ 000$  步，如此重复，直至石墨烯被拉断。

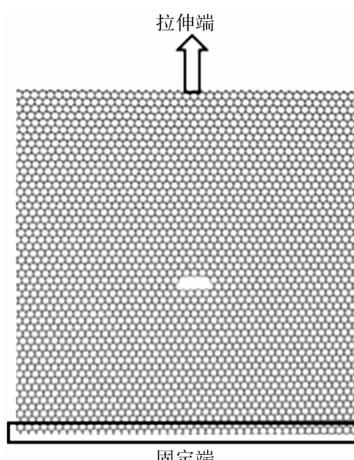


图 3 含裂纹石墨烯拉伸示意图  
Fig. 3 Tensile model of graphene with a crack

## 2 结果与分析

为研究离子辐照对石墨烯缺陷修复的效果, 主要进行了以下几个问题的探索: (1) 利用辐照修复石墨烯裂纹缺陷是否可行。 (2) 温度对辐照后石墨烯拉伸力学性能的影响。 (3) 辐照剂量和辐照能量对辐照效果的影响。

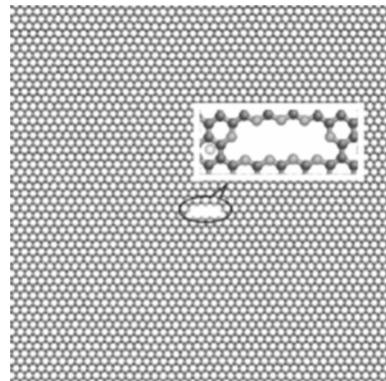
### 2.1 辐照修复可行性分析

首先, 建立 C 离子辐照含裂纹石墨烯模型, 辐照高度 4.2 nm, 辐照剂量  $3.75 \times 10^{15} / \text{cm}^2$ , 辐照能量 2 eV 的 C 粒子垂直入射到含缺陷石墨烯薄膜上表面。所得辐照过程中的原子构型图如图 4 所示, 其中, 圆形实心体表示碳原子, 实心体之间的杆表示石墨烯碳原子之间以及与入射粒子之间的成键。

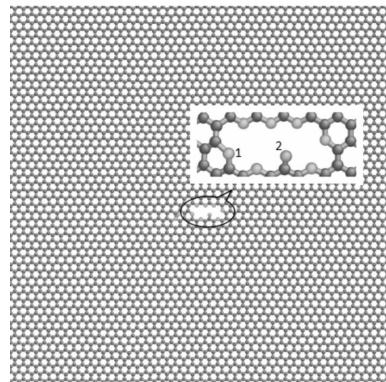
观察辐照过程图 4(a)~(f), 可以看到入射粒子与缺陷处靶原子形成吸附/成键的作用, 使得其结构变得完整, 缺陷不断的减少。入射粒子与靶原子所成的共价键有两种情况, 一种使得原来存在的缺陷结构变得完整, 正是由于这种共价键的作用才使得材料在拉伸破坏时力学性能有所提高, 如图 4(b)中原子 1; 另一种则是与靶原子成单键, 这对于材料力学性能几乎没有影响, 如图 4(b)中原子 2。随着辐照剂量的增加, 先入射粒子作为新的靶原子与后入射粒子形成新的共价键, 如图 4(c)中原子 3。每完成一个离子的入射, 都要对模型进行充分弛豫使得系统达到平衡状态, 在这个过程中入射粒子和靶原子可能会偏离原来的位置, 当原子间的距离到达原子间成键范围时, 会形成新的共价键作用, 如图 4(c)、(d)的黑框中所示。由于入射的随机性, 入射粒子所形成的结构难以控制, 有的呈规则六边形有序的排列, 有的则不是, 但总体来说, 辐照修复后缺陷面积减小, 这也是辐照起作用的一个最直接的表征, 如图 4(f)所示。从化学方面分析, 化学键只是相互作用的一个外在表征, 由于热运动的存在, 原子的位置总是在不断变化的, 成键原子之间的距离不是一个定值。当两碳原子间距离大于其范德华半径 ( $r_{\text{范}} = 0.17 \text{ nm}$ ) 时<sup>[21]</sup>, 原子间作用力表现为范德华力较小, 可忽略不计; 当两碳原子间距离小于其范德华半径时, 碳碳原子存在较大的作用力, 表现为成键。观察共价键的形成方式, 在裂纹位置附近, 当辐照能量较小时, 辐照离子无法穿透靶原

子, 会停留在靶原子附近, 当二者距离  $r \leq r_{\text{范}}$  时, 入射原子对石墨烯缺陷处的靶原子起“桥接”作用, 入射原子与靶原子形成新的共价键。

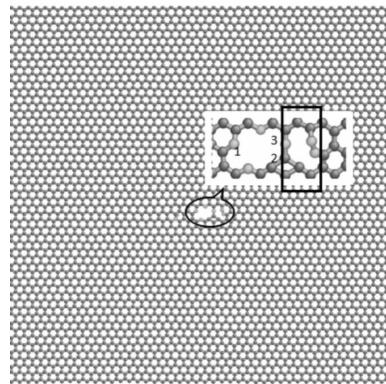
衡量修复效果的一个直接标准就是其拉伸力学性能的提高, 对辐照前后石墨烯模型沿垂直于裂纹方向进行拉伸, 并与完美石墨烯的拉伸应力-应变曲线进行比较, 如图 5 所示。可以看出, 缺陷对石墨烯的拉伸力学性能有着重要的影响, 与完美石墨烯相比, 含裂纹石墨烯的拉伸强度由 93.8 GPa 下降到 54.9 GPa, 拉伸极限应变由 0.120 下降到 0.053, 辐照修复后的石墨烯其拉伸强度和拉伸极限应变分别为 76.1 GPa 和 0.093, 相对于辐照前, 其拉伸强度和拉伸极限应变分别提高了 22.7% 和 34.2%, 但相对于完美石墨烯, 还低 18.8% 和 22.5%。因此, 利用辐照修复石墨烯裂纹是可行的。



(a)



(b)



(c)

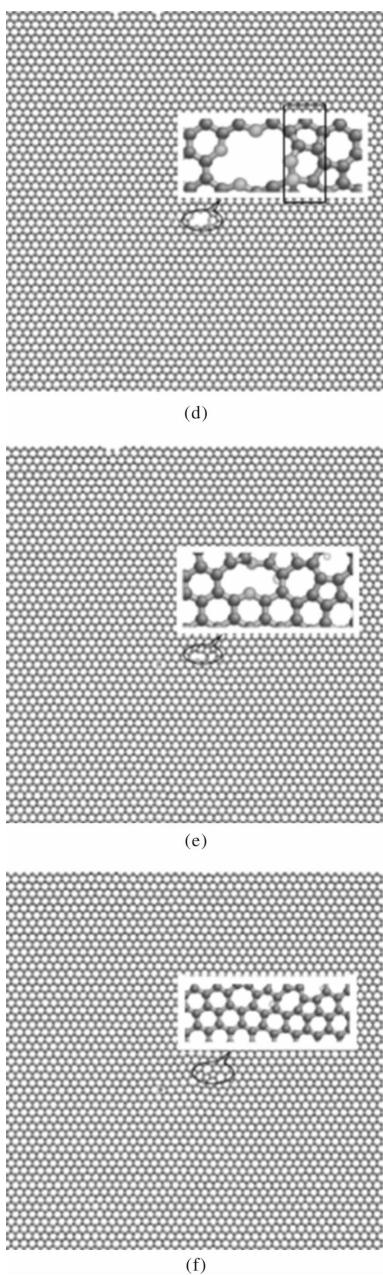


图 4 辐照修复过程

Fig. 4 Irradiation repair process

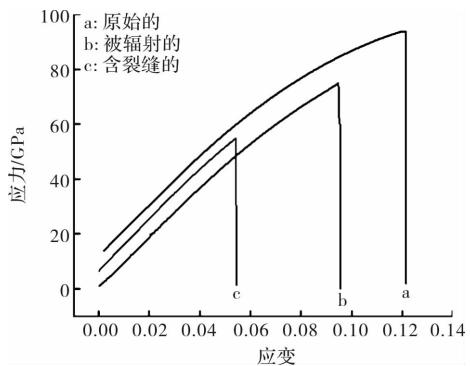


图 5 完美、辐照前后石墨烯的拉伸应力-应变曲线

Fig. 5 Three cases of stress-strain curves of graphene

## 2.2 温度相关性研究

不同温度条件下, 石墨烯的拉伸力学性能是不

同的。从热力学角度分析, 随着温度的升高, 原子动能增加, 这将对石墨烯稳定的蜂窝状规则六边形结构和其优异的性能产生影响。以辐照后石墨烯为研究对象, 对其在不同温度( $0\sim 1000\text{ K}$ )条件下的拉伸力学性能进行分子动力学模拟, 结果如图 6 所示, 图 7 是拉伸强度和拉伸极限应变随温度变化图, 其中直线为拉伸强度和拉伸极限应变随温度变化的线性拟合, 可以看出温度对辐照修复后石墨烯力学性能的影响非常明显。随着温度的升高, 其力学性能不断降低, 拉伸强度和拉伸极限应变近似线性变化, 其中拉伸强度由 86.4 GPa 降至 32.8 GPa, 降幅为 62.0%; 拉伸极限应变由 0.106 降至 0.042, 降幅为 60.2%, 这与文献[13]和文献[15]中得出的石墨烯力学性能对温度依赖性的结论相一致。这是由于拉伸过程中, 原子不仅受外力的影响, 还受到热振动的影响, 温度越高, 原子的动能就越大, 原子就越容易达到足够能量脱离平衡位置, 形成破坏。

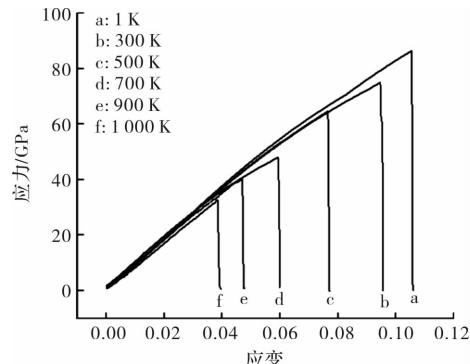


图 6 辐照修复后石墨烯在不同温度下的拉伸应力-应变曲线

Fig. 6 Stress-strain curve of irradiated graphene at various temperatures

## 2.3 不同辐照因素下辐照效果的分析

由前面的分析可知, 为了使得辐照粒子很好的发挥其“修复”的功能, 辐照粒子的能量不能过大或过小, 与此同时, 辐照剂量也应该适量。为研究这两因素对辐照效果的影响, 重复之前的辐照过程, 进一步研究 C 离子辐照能量  $0.5\sim 10\text{ eV}$ , 辐照剂量  $1.25\times 10^{15}\sim 8.75\times 10^{15}/\text{cm}^2$  时的辐照效果。

### 2.3.1 辐照剂量的影响

由于辐照剂量和辐照能量两个因素都对辐照效果有影响, 为简化计算, 根据文献, 选取辐照能量  $4\text{ eV}$ [22], 辐照剂量  $1.25\times 10^{15}\sim 8.75\times 10^{15}/\text{cm}^2$ , 辐照高度  $4.2\text{ nm}$  的 C 离子垂直入射到含裂纹石墨烯薄膜上表面, 辐照后的拉伸应力-应变曲线如图 8 所示, 拉伸力学性能如图 9 所示, 其中辐照

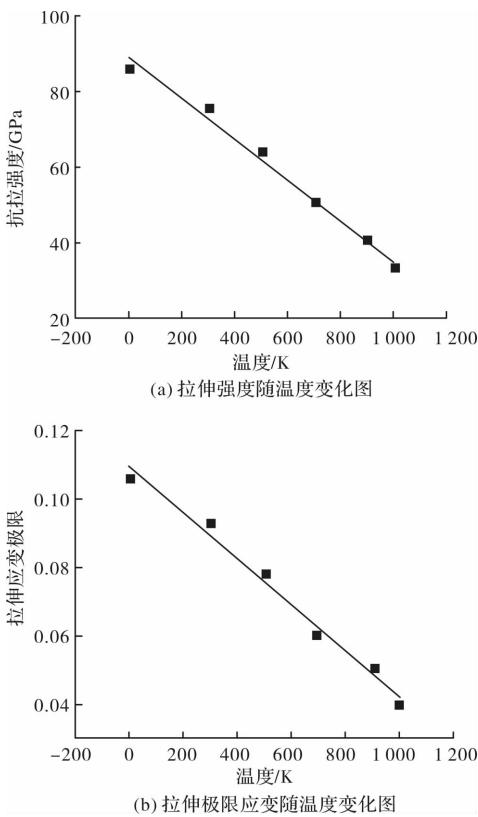


图 7 辐照修复石墨烯拉伸强度和拉伸极限应变随温度变化图

Fig. 7 Tensile strength and limit tensile strain of irradiated graphene vs. temperature

剂量为 0 时, 即为未修复情况。由图 8 和图 9 可以看出, 辐照剂量的过大或过小, 其辐照效果都不好, 这是由于当辐照剂量较小时, 共价键重组不完整, 即修复不完整, 随着辐照剂量的增加, 修复作用逐渐加强, 当辐照剂量较大时, 在修复过程中容易造成共价键重组混乱, 这也会影响辐照效果。当辐照剂量在  $2.50 \times 10^{15} \sim 3.75 \times 10^{15} / \text{cm}^2$  范围时, 其力学性能均有所提高, 辐照达到修复效果。

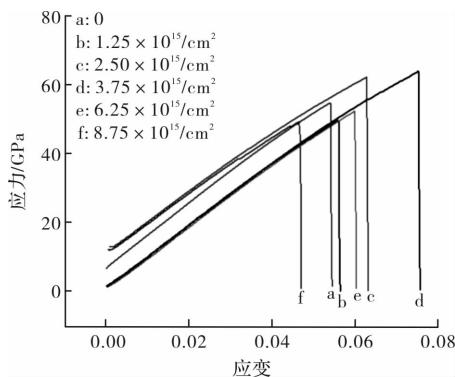


图 8 不同剂量 C 离子辐照后的拉伸应力-应变曲线  
(辐照能量: 4 eV)

Fig. 8 Stress-strain curve of graphene irradiated by Carbon ions with different doses (incident energy: 4 eV)

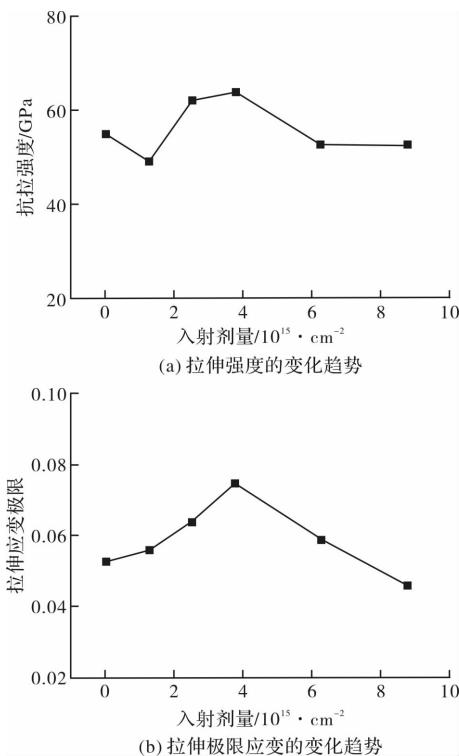


图 9 不同剂量 C 离子辐照后, 石墨烯力学性能的变化  
(辐照能量: 4 eV)

Fig. 9 Mechanical properties of graphene irradiated by Carbon ions with different doses (incident energy: 4 eV)

### 2.3.2 辐照能量的影响

分别选取辐照剂量  $2.50 \times 10^{15} / \text{cm}^2$  和  $3.75 \times 10^{15} / \text{cm}^2$ , 辐照能量  $0.5 \sim 10 \text{ eV}$ , 辐照高度  $4.2 \text{ nm}$  的 C 离子垂直入射到含裂纹石墨烯薄膜上表面, 辐照后的拉伸结果分别如图 10、图 11 所示, 拉伸力学性能如图 12(a)~(b)所示, 其中能量为 0 时, 即为未修复的情况, 与之比较, 可以看出, 辐照能量过大或过小, 其修复效果并不理想, 甚至会使其力学性能更加降低。当入射粒子能量较小时, 在辐照过程中入射粒子会吸附在石墨烯缺陷表面, 与靶原子之间的作用较弱, 在拉伸过程中很容易破坏。随着

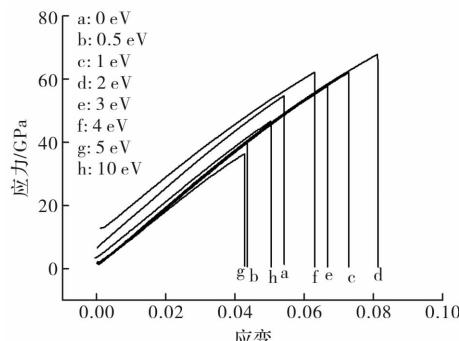


图 10 不同能量 C 离子辐照后的拉伸应力-应变曲线  
(辐照剂量:  $2.50 \times 10^{15} / \text{cm}^2$ )

Fig. 10 Stress-strain curve of graphene irradiated by Carbon ions with different energies (incident dose:  $2.50 \times 10^{15} / \text{cm}^2$ )

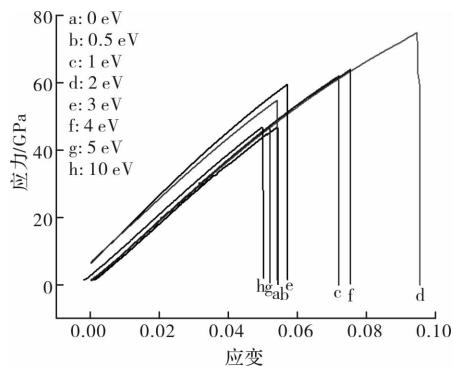


图 11 不同能量 C 离子辐照后的拉伸应力-应变曲线  
(辐照剂量:  $3.75 \times 10^{15} / \text{cm}^2$ )

Fig. 11 Stress-strain curve of graphene irradiated by Carbon ions with different energies(incident dose:  $3.75 \times 10^{15} / \text{cm}^2$ )

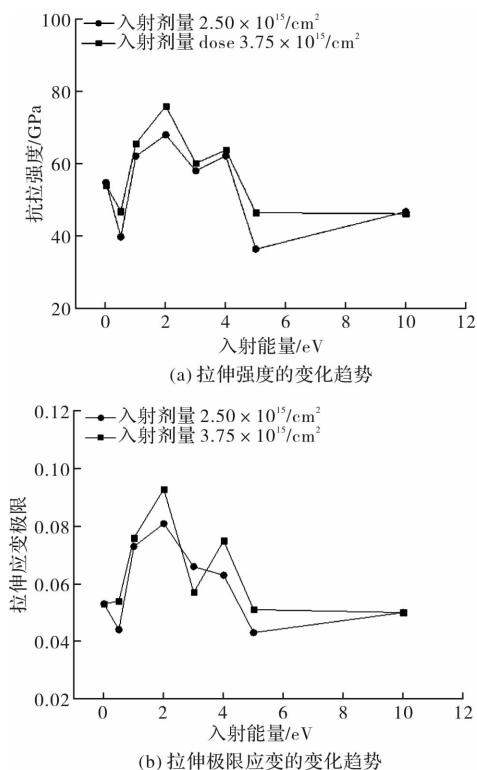


图 12 石墨烯样品被不同能量 C 离子辐照后,  
其力学性能的变化

Fig. 12 Mechanical property of graphene irradiated by Carbon ions with different energies

入射粒子能量的增加, 共价键作用逐渐加强。当入射粒子能量较大时, 入射粒子会穿透靶原子, 形成新的缺陷, 这些新的缺陷也会对石墨烯的力学性能造成影响。当辐照能量在 1~4 eV 范围时, 力学性能有所提高, 辐照达到修复目的。

### 3 结论

基于辐照修复思想, 用分子动力学方法, 研究了 C 离子辐照含裂纹石墨烯以达到修复缺陷提高其它力学性能的目标, 得出以下结论:

(1) 辐照过程中, 入射粒子与缺陷处成键不饱和的靶原子可以形成共价键, 使得缺陷逐渐减小, 并提高了其力学性能。

(2) 辐照后石墨烯的拉伸力学性能对温度有很强的依赖性。当温度从 0 K 升高至 1 000 K 时, 其拉伸强度和拉伸极限应变均随着温度的升高近似线性降低。

(3) 在辐照修复过程中, 辐照剂量和辐照能量均对辐照效果有很大的影响。就本文选取的裂纹而言, 辐照剂量取  $2.50 \times 10^{15} \sim 3.57 \times 10^{15} / \text{cm}^2$ , 辐照能量取 1~4 eV 范围时, 辐照可达到修复缺陷, 提高其力学性能的目的。

### 参考文献 References

- [1] GEIM A K. Graphene status and prospects [J]. Science. 2009, 324(5934): 1530-1534.
- [2] 华军, 武霞霞, 李东波, 等. 基于神经网络的石墨烯弹性参量识别方法研究[J]. 西安建筑科技大学学报(自然科学版), 2015, 47(5): 760-765.  
HUA Jun, WU Xiaoxia, LI Dongbo, et al. Idenfication of elastic parameters method for graphene based on neural network [J]. J. of Xi'an Univ. of Arch. & Tech. ( Natural Science Edition ), 2015, 47 ( 5 ): 760-765.
- [3] RAO C N R, SOOD A K, RAKESH Voggu, et al. Some novel attributes of graphene [J]. Phys chem. Lett, 2010, 1(2): 527-580.
- [4] DONG XC, LONG Q, WEI A, et al. The electrical properties of graphene modified by bromophenyl groups derived from a diazonium compound[J]. Carbon, 2012, 50(4): 1517-1522.
- [5] 梁力, 赵仕俊, 王宇钢, 等. 重粒子辐照下石墨烯力学性能的分子动力学研究[J]. 北京大学学报(自然科学版), 2013, 49(3): 365-370.  
LIANG Li, ZHAO Shijun, WANG Yugang, et al. Molecular dynamics simulation of graphene under mechanical properties irradiated by heavy particles [J]. Journal of Beijing Acta Scientiarum Naturalium Universitatis Pekineneis, 2013, 49(3): 365-370.
- [6] GIUSEPPE Compagnini, FILIPPO Giannazzo. Ion irradiation and defect formation in single layer graphene [J]. Carbon, 2009, 47(14): 3201-3207.
- [7] LIU Lili, QING Miaoqing, WANG Yibo, et al. Defects in Graphene: Generation, Healing, and Their Effects on the Properties of Graphene: A Review [J]. Journal of Materies Science & Technology, 2015(31): 599-606.
- [8] HUA Jun, LI Dongbo, ZHAO Dong, et al. Reaserch on the mechanics performance of graphene based on the modified molecular mechanics method[J]. Journal of

- Wuhan University of Technology(Materials Science Edition), 2015,30(6):1172-1178.
- [9] 戴宪起,孙永灿,赵建华,等.空位和Si参杂对In在石墨烯上吸附的影响[J].新型炭材料,2011,26(1):46-51.  
DAI Qixian, SUN Yongcan, ZHAO Jianhua, et al. Space and Si mixed affect In adsorption on graphene [J]. New Carbon Materials, 2011,26(1): 46-51.
- [10] WU Xin, ZHAO Haiyan, ZHONG Minlin, et al. Molecular dynamics simulation of graphene sheets joining under ion beam irradiation[J]. Carbon, 2014(66): 31-38.
- [11] 丁怀燕,郭江江.紫外辐照法制备Ag纳米颗粒用于石墨烯表面缺陷的标记和修复[J].北京工业大学学报,2015(1):149-152.  
DING Huaiyan, GUO Jiangjiang, Labeling and repairing the defects of chemically reduced graphene oxide using UV-induced Ag nanoparticles[J]. Journal of Beijing University of Technology, 2015(1): 149-152.
- [12] 张科举,詹福如.氧化石墨烯的离子束辐照表面改性[J].材料导报,2013,27(8): 55-58.  
ZHANG Keju, ZHAN Furu. The surface modification of graphene oxide by ion beam irradiation [J]. Materials Review, 2013,27(8): 55-58.
- [13] 黄凌燕,韩强.单层石墨烯温度效应的分子动力学模拟[J].中国科学:物理学 力学 天文学,2012,42(3):319-326.  
HUANG Lingyan, HAN Qiang. Molecular dynamics simulation of temperature effect on mono-layer graphene sheet[J]. SIENTIA SINICA Physica, Mechanica & Astronomica, 2012,42(3): 319-326.
- [14] 黄键影,韩强.梯度拉伸下锯齿型石墨烯褶皱的分子动力学模拟[J].华南理工大学学报(自然科学版),2015,43(6):122-126.  
HUANG Jianzhang, HAN Qiang. Molecular dynamics simulation of wrinkles in zigzag graphene under gradient tension[J]. Journal of South China University of
- Technology (Nature Science Edition), 2015, 43 (6): 122-126.
- [15] 熊立婷,高原文.温度对石墨烯条带拉伸力学性能影响的模拟研究[J].中国科学:物理学 力学 天文学,2012,42(2): 156-161.  
XIONG Liting, GAO Yuanwen. Atomistic simulations of temperature dependences of tensile mechanical for graphene nanoribbons[J]. SIENTIA SINICA Physica, Mechanica & Astronomica,, 2012,42(2): 156-161.
- [16] STEVEN J, ALAN B. A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions [J]. Journal of Chemical Physics, 2000,112(14): 6472-6486.
- [17] NOSE S. A molecular dynamics method for simulation in the canonical ensemble [J]. Molecular Physics, 1984,52:255-268.
- [18] HOOVER W G. Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions [J]. Physical Review A, 1985,31(3): 1695-1697.
- [19] 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模拟[J].新型炭材料,2010,25(4):261-266.  
HAN Tongwei, HE Pengfei, WANG Jian, et al. Molecular dynamic simulation of a single graphene sheet under tension [J]. New Carbon Materials, 2010, 25 (4): 261-266.
- [20] 胡盛志,谢兆雄,周朝晖.晶体范德华半径的70年[J].物理化学学报,2010,26(7): 1795-1800.  
HU Shengzhi, XIE Zhaohui, ZHOU Chaohui. 70 Years of crystallographic van der Waals Radii[J]. Acta Phys-Chim. Sin, 2010,26(7): 1795-1800.
- [21] 梁圣伟.单层石墨烯辐照损伤后的拉伸特性研究[D].西安:西安建筑科技大学,2014.  
LIANG Shengwe. Research of single layer Graphene's mechanics behavior after irradiation damage [D ]. Xi'an: Xi'an Univ. of Arch. & Tech,2014.

(编辑 桂智刚)

(上接第 140 页)

- [15] 中华人民共和国建设部,GB50017-2003 钢结构设计规范[S].北京:中国计划出版社,2003.  
Ministry of construction of the People's Republic of China, GB50017-2003 Design Code for Steel Structure [S]. Beijing: China Planning Press, 2003.
- [16] 杨晓东,雷艳春,尚建丽,等.建筑钢结构熔透对接焊缝缺陷对焊缝抗拉强度影响的研究[J].西安建筑科技大学学报(自然版),2011,43(5):730-734.  
YANG Xiaodong, LEI Yanchun, SHANG Jianli, et al. Study on the influence of building steel structure

- butt weld fusion defects on weld tensile bearing capacity[J]. J. Xi'an Univ. of Arch. & Tech. (Natural science Edition),2011,43(5):730-734.
- [17] 杨晓东,周鹏,杨芳,等.钢结构焊缝超声波探伤当量孔径的计算[J].无损检测,2011,33(9):68-71.  
YANG Xiaodong, ZHOU Peng, YANG Fang, et al. Caculation of defects equivalent aperture in ultrasonic testing of steel structure weld. [J]. Nondestructive Testing, 2011,33(9):68-71.

(编辑 桂智刚)