

Cu 改性石墨烯/铝界面的第一性原理计算研究

廖高汉, 杜晓明

(沈阳理工大学 材料科学与工程学院, 沈阳 110159)

摘要: 为研究石墨烯/铝复合材料界面的改性机制, 建立 Cu 改性的石墨烯/铝复合材料微观界面模型, 采用基于密度泛函理论(DFT)的第一性原理计算方法计算界面结合强度、差分电荷密度、分波态密度、键布居等参数。结果表明: Cu 改性的石墨烯/铝复合材料界面中 Cu 原子会与 Al 原子形成金属键, 能够显著提高石墨烯界面的结合强度; 随着 Cu 吸附于石墨烯上位置的改变, Cu 原子与 Al 原子形成更多的金属键, 从而提高石墨烯/铝复合材料界面的结合强度; 界面黏附功大小依次为桥位(B)、洞位(H)、顶位(T)。该方法可为石墨烯/铝复合材料的界面结构设计提供理论指导。

关键词: 石墨烯; 铝基复合材料; 界面改性; 第一性原理计算

中图分类号: TP111.1 **文献标志码:** A **DOI:** 10.3969/j.issn.1003-1251.2025.06.008

First-principles Computational Study of the Cu-modified Graphene/Aluminum Interface

LIAO Gaohan, DU Xiaoming

(Shenyang Ligong University, Shenyang 110159, China)

Abstract: In order to study the modification mechanism of graphene/aluminum composite interface, a model of Cu-modified graphene/aluminum composite interface is constructed by using first-principle calculations based on the density flooding theory (DFT), and the interfacial bonding strength, differential charge density, fractional-wave state density, and bonding fabric residence parameters are systematically analyzed. The results show that the Cu atoms in the Cu-modified graphene/aluminum composite interface will form metallic bonds with Al atoms, which significantly improves the bonding strength of the graphene interface. And with the change of the position of graphene adsorbed by Cu, more metal bonds between Cu atoms and Al atoms will be formed to improve the interfacial bonding strength. The magnitude of the interfacial adhesion work is: bridge position(B) > hole position(H) > top position(T), which provides theoretical guidance for the composition and structure design of graphene/aluminum composites in the future.

Key words: graphene; aluminium matrix composites; interface modification; first-principle calculation

铝基复合材料因轻质、高比强度、高比模量、优异的尺寸稳定性等性能在航空航天、国防军事和轨道交通等领域广泛应用^[1-3]。然而,传统铝

基复合材料存在界面结合弱、增强相分布不均等问题,影响其高性能的发挥^[4]。石墨烯(Gr)作为一种二维碳纳米材料,具有强度高、延展性好、导

电导热性强等优良的物理和力学性能^[5-7]。研究表明^[8-10],添加少量的石墨烯,铝合金基体的性能得到大幅提升。石墨烯对铝合金基体性能的增强效果与石墨烯的均匀分散性和界面结合性质密切相关^[11]。有研究表明^[12-14],石墨烯增强铝基复合材料中的石墨烯团聚会显著降低载荷传递效率,进而导致材料综合性能的劣化^[15-16]。此外,复合材料的界面性质,如界面结合强度和界面润湿性等,也会影响应力传递机制和界面失效行为。文献[17]表明,理想的界面结合不仅能有效抑制石墨烯的团聚,也能通过优化应力分布实现材料性能的显著提升。然而,由于现有的界面表征手段不够完善,对于界面微区中纳米尺度下的原子间的相互作用行为及其演化机理难以通过实验手段进行原位观测。

综上,有必要采用第一性原理计算方法研究复合材料界面微区中基体原子与增强体间的界面结合性质,为调控复合材料的宏观性能提供理论依据。Liu等^[18]采用第一性原理计算方法研究了石墨烯中原子掺杂对石墨烯/铝界面键合性能的影响,发现石墨烯中的N掺杂或B掺杂可以明显增强界面键合强度。Huang等^[19]研究了Al(100)、Al(110)和Al(111)不同表面与石墨烯结合的稳定性,发现Al(111)表面与本征石墨烯界面结合强度最高。Zhang等^[20]模拟了不同类型的金属/石墨烯界面,给出了界面间原子的电子轨道及成键情况。Huang等^[21]模拟了包覆不同合金元素的石墨烯/铝界面,结果表明合金元素在一定程度上可以改善石墨烯/铝的界面结合性质。

目前有关过渡金属改性石墨烯/铝界面润湿与界面结合的问题尚未从理论角度得到充分的认识。本文从原子角度出发,采用基于密度泛函理论的第一性原理计算方法,研究石墨烯/铝及铜改性石墨烯/铝界面结合和电子结构,分析界面结合的稳定性,筛选出Cu负载于石墨烯表面的稳定位置。探讨石墨烯/铝界面粘结的机理,为高性能石墨烯/铝复合材料的性能优化提供参考。

1 计算方法与计算模型

1.1 计算方法

使用 Quantum-ESPRESSO 程序包^[22]进行结构优化、能量计算及电子结构计算。计算选取 Ultrasoft 超软赝势^[23],交换关联泛函使用 GGA-PBE

形式^[24-25],布里渊区K点取样选取 Monkhorst-Pack 网格^[26],铝晶胞结构优化及表面计算采用截断能为500 eV,K点网格分别为 $6 \times 6 \times 6$ 和 $4 \times 4 \times 2$;石墨烯晶胞结构优化及表面计算选取截断能为500 eV,K点网格分别为 $6 \times 6 \times 6$ 和 $6 \times 6 \times 3$;铜晶胞结构优化及表面计算采用截断能为500 eV,K点网格分别为 $6 \times 6 \times 6$ 和 $4 \times 4 \times 2$;界面模型最佳界面间距测试及结构优化使用截断能为500 eV,K点网格为 $5 \times 5 \times 1$ 。自洽场能量收敛到 1×10^{-5} eV/atom(原子),弛豫到每个原子间的力不超过 0.03 eV/Å,应力误差不超过 0.05 GPa,位移误差不超过 0.001 Å。

1.2 计算模型

首先对铝、铜、石墨烯的晶胞模型进行结构优化,其计算结果与文献[27-29]数据如表1所示。由表1可知,本文计算的晶胞参数与文献值基本一致。

表1 铝、铜、石墨烯的晶胞参数优化结果和文献数据
Table 1 Calculated results and literature data of cellular parameters of aluminum, copper and graphene

| | 晶胞参数 | 文献数据 |
|----|---------------------|-------------------------------------|
| Al | $a = b = c = 0.405$ | $a = b = c = 0.403$ ^[27] |
| Gr | $a = b = 0.246$ | $a = b = 0.246$ ^[28] |
| Cu | $a = b = c = 0.361$ | $a = b = c = 0.362$ ^[29] |

构建 Al(111)、Al(110)、Al(100)和Gr(0001)晶面,Al各晶面表面能(E_{surf})的计算式为

$$E_{\text{surf}} = \frac{E_{\text{slab}} - NE_{\text{bulk}}}{2A_1} \quad (1)$$

式中: E_{slab} 为表面体系能量; E_{bulk} 为单胞总能量; N 为表面体系能量与单胞总能量的原子数之比; A_1 为表面积。由式(1)计算Al(111)表面能为 0.720 J/m²,Al(110)表面能为 0.938 J/m²,Al(100)表面能为 0.832 J/m²,Gr(0001)表面能为 0.926 J/m²。Al各晶面表面能大小排序为:Al(110) > Al(100) > Al(111)。

为平衡计算精度与效率,本研究采用分阶段建模策略。Al/Gr界面模型先以3层铝原子层模型与单层理想石墨烯构成,固定底端1层铝原子层,真空层的厚度设置为 15 Å,筛选出界面结合的Al最佳晶面。根据上述优化结果,拟采用 2×2 的石墨烯表面模型匹配 2×2 的不同晶面指数的Al表面模型构建石墨烯/铝界面模型,如图1所示。为尽可能降低铝原子层数对Al/Gr界面模型的影响,Al/Gr界面模型由7层铝原子

层模型与吸附在顶部的单层理想石墨烯构成,通过固定底端 Al 模拟金属块体。基于第一性原理计算开展层数收敛性分析,通过系统考察固定层数从 1 至 6 层的结构模型,Al/Gr 界面模型选择固定 5 层 Al,使最上 2 层 Al 对石墨烯进行界面结合最佳。

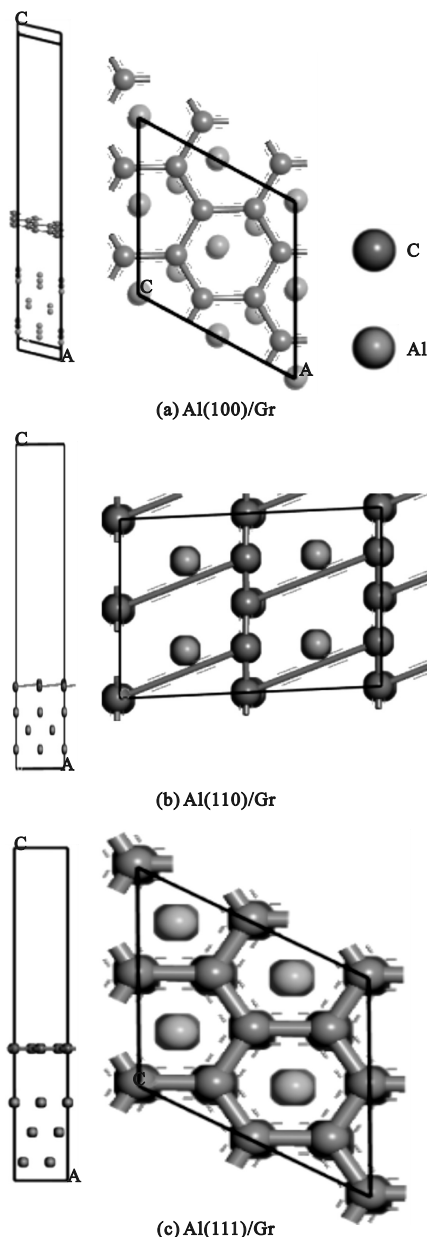


图 1 Gr/Al 不同晶面界面模型主、俯视图

Fig. 1 Main and top views of Gr/Al interface model with different crystal surfaces

为研究复合界面模型中 Al 与 C 的作用点位对界面稳定性的影响,选用最稳定的 Al(111)/Gr 界面模型,构建 Al 原子吸附于石墨烯上的顶位(T)、桥位(B)和洞位(H)三种界面模型,如图 2 所示。

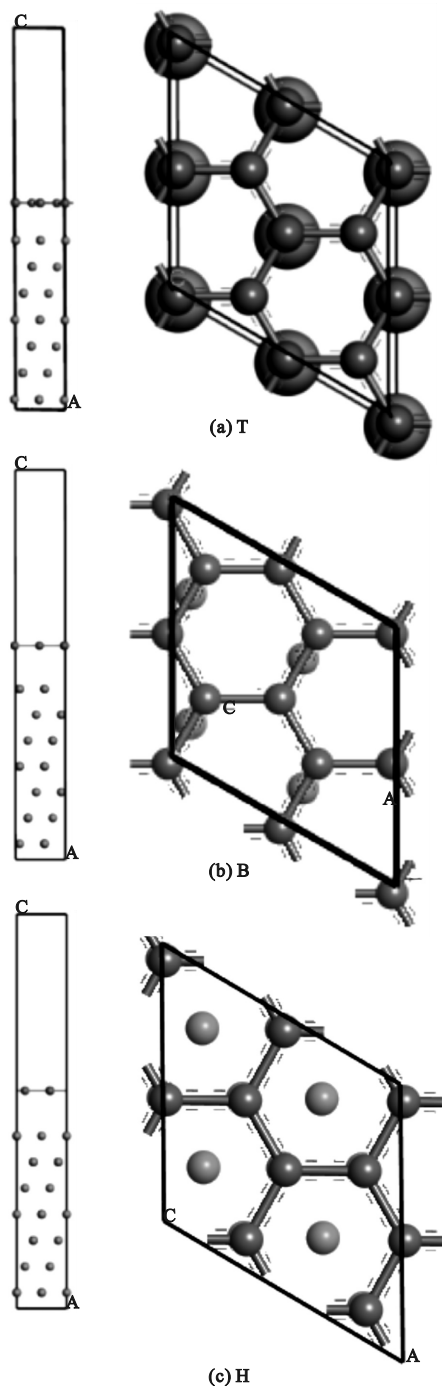


图 2 Al 原子吸附在石墨烯不同位置的模型图

Fig. 2 Model diagrams of aluminum atoms adsorbed at different positions of graphene

此外,本文构建 Cu 改性石墨烯的复合材料界面模型,即 Al/Cu/Gr 界面模型。考虑到不同晶面指数的 Cu 表面对复合界面模型稳定性的影响,依次优化出 Cu(111)、Cu(110)和 Cu(100),表面能分别为 1.681、1.804 和 1.984 J/m²。按照表面能最低,表面最稳定的原则,选用 Cu(111)表面构建 Al(111)/Cu(111)/Gr(0001)界面模型。同样考虑 Cu 原子分别吸附于石墨烯上的 T、B 和 H 三种

界面模型,如图3所示。

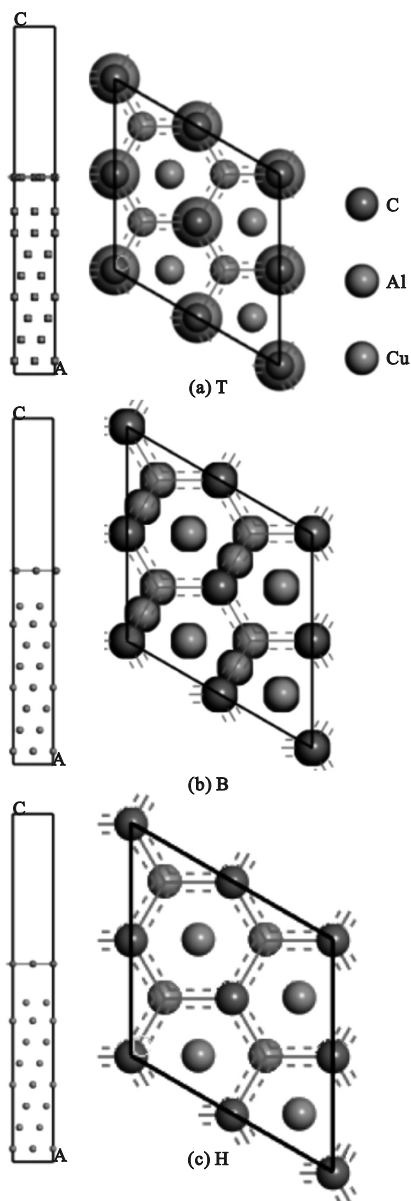


图3 Cu原子吸附在石墨烯不同位置的模型图

Fig.3 Model diagrams of copper atoms adsorbed at different positions in graphene

2 结果与讨论

2.1 界面黏附功和界面能

对于复合界面结构,可以通过界面结合能 E_b 、界面黏附功 W_b 来表示界面结合的强弱。 E_b 、 W_b 的计算式为

$$E_b = E_{G/M} - E_G - E_M \quad (2)$$

$$W_b = -E_b/2A_2 \quad (3)$$

式中: E_G 、 E_M 分别代表石墨烯表面和金属表面的

总能量; $E_{G/M}$ 表示石墨烯/金属界面平衡构型的能量; A_2 表示界面结合面积。若 $E_b < 0$,表明界面结构稳定;若 $E_b > 0$,表明界面结构不稳定。 W_b 用来衡量界面的结合性,其表示单位面积的表面形成界面时对外界所做的功, W_b 数值越大说明界面结合强度越强。Al(100)/Gr、Al(110)/Gr、Al(111)/Gr的 E_b 和 W_b 计算结果如图4所示。由图可知,Al/Gr界面模型中稳定性大小排序为Al(111)/Gr > Al(100)/Gr > Al(110)/Gr。本文结论与文献[19]一致。

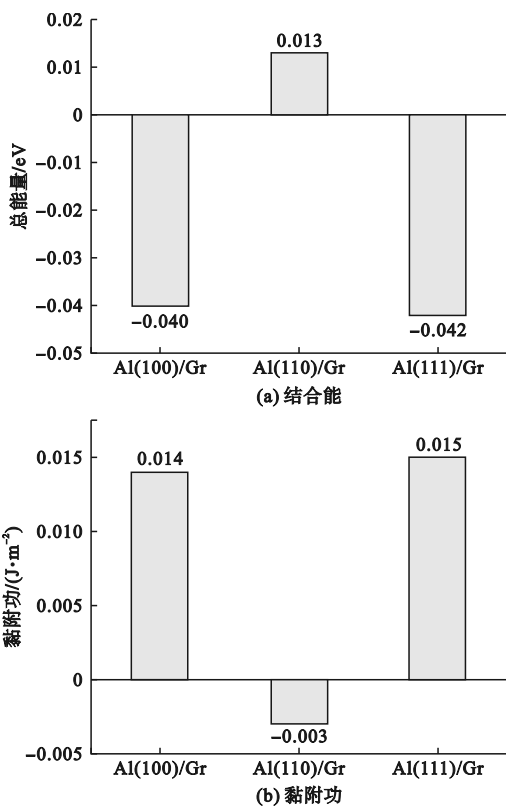


图4 铝各晶面与石墨烯的界面结合能及黏附功

Fig.4 Interfacial binding energy and adhesion work of each crystalline surface of aluminum with graphene

由图4可知,Al原子在石墨烯表面上的B吸附位上的界面结合能及黏附功最低,其次是T吸附位,H吸附位的界面结合能及黏附功最高。表明Al原子在石墨烯表面上的桥位是最稳定构型。

对于Al(111)/Gr界面模型,Al原子吸附于石墨烯不同点位的界面结合能及黏附功计算结果如图5所示。

对于Cu改性石墨烯的Al(111)/Cu(111)/Gr(0001)界面模型,界面能和黏附功的计算结果如图6所示。

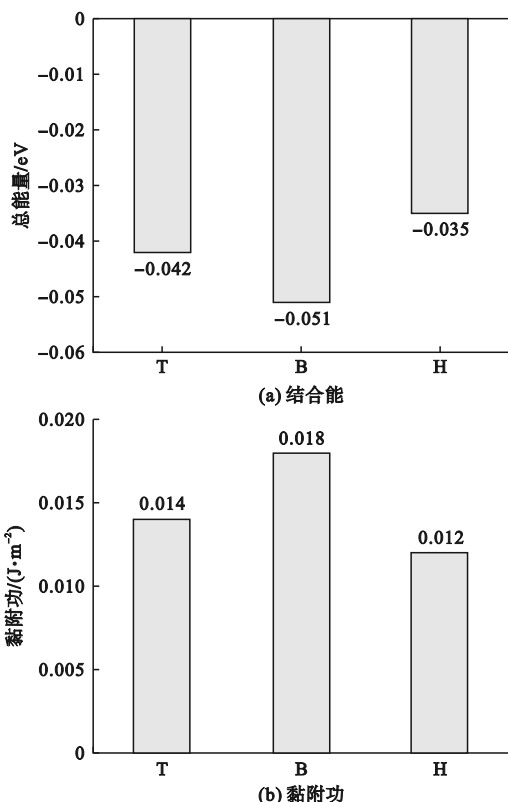


图 5 Al 原子吸附在石墨烯不同位置的界面结合能及黏附功

Fig. 5 Interfacial binding energy and work of adhesion of aluminum atoms adsorbed at different positions of graphene

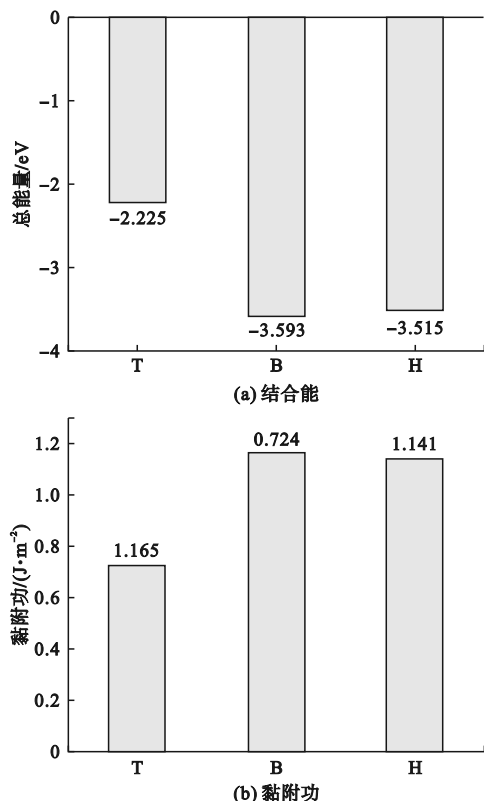


图 6 Cu 原子吸附在石墨烯不同位置的界面结合能及黏附功

Fig. 6 Interfacial binding energy and adhesion work of copper atoms adsorbed at different positions of graphene

由图 6 可知,Cu 位于石墨烯表面的桥位时,Al(111)/Cu(111)/Gr(0001) 界面具有最低的界面能和最高的黏附功,其次是洞位,而顶位则显示出相对较弱的结合性能。与未改性的 Al/Gr 界面体系相比,Cu 改性后的 Al/Gr 复合界面在所有吸附位点均展现出显著增强的黏附功。表明石墨烯镀 Cu 有利于提高 Al/Gr 界面的结合强度。本文与文献[30]的结论一致。

2.2 差分电荷密度

差分电荷密度反映原子间的成键、电荷分布和转移等。三种 Al/Gr 界面模型和三种 Al/Cu/Gr 界面模型的差分电荷密度计算结果分别如图 7、图 8 所示。

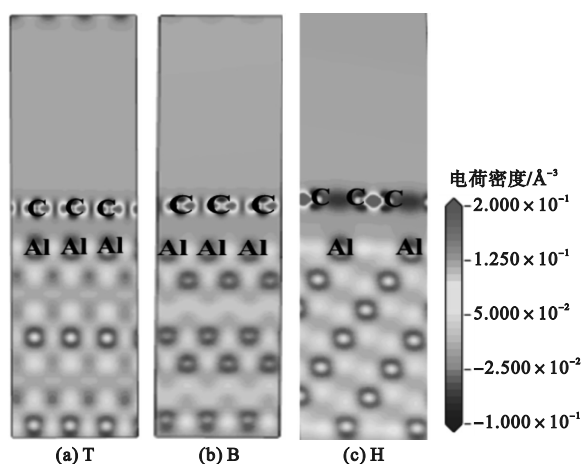


图 7 Al 原子吸附在石墨烯不同位置的模型差分电荷图

Fig. 7 Model differential charge diagrams for aluminum atoms adsorbed at different positions of graphene

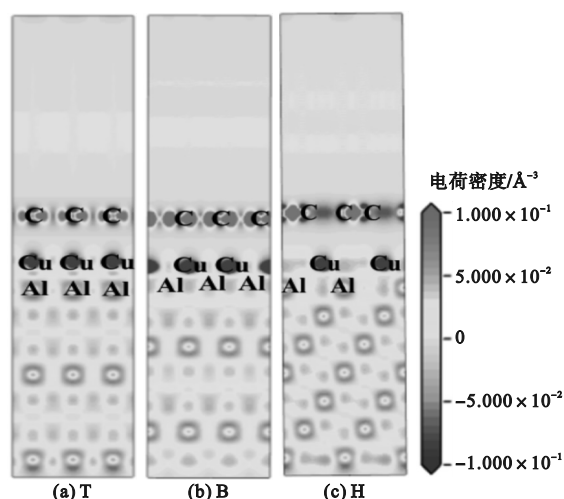


图 8 Cu 原子吸附在石墨烯不同位置的模型差分电荷图

Fig. 8 Modeled differential charge diagrams of copper atoms adsorbed at different positions of graphene

由图 7 可见,C 原子与 Al 原子之间未出现电荷转移和累积,表明 Al 原子和 C 原子之间主要通过范德华力作用形成物理吸附界面。对比图

8(a)~8(c)可知,尽管Cu原子与C原子间没出现电荷转移和累积,但Cu原子和Al原子却存在差分电荷累积,说明Cu原子与Al原子形成了Cu—Al键。表明Cu(111)表面和Gr表面仍为物理界面,但Cu(111)表面与Al(111)表面形成了化学界面。图8(b)、8(c)相对于8(a)而言,单个Al原子与多个Cu原子之间形成了Cu—Al键,表明Al/Cu/Gr界面的界面能、黏附功随Cu—Al键的增加而变大。

2.3 态密度和 Mulliken 键布居分析

态密度(density of states, DoS)表示每电子伏特的状态数,可直观表达原子间的成键作用情况。六种复合界面模型的总态密度(total density of states, TDoS)和C、Al、Cu原子的分波态密度(partial density of states, PDoS)计算结果如图9和图10所示。图中s、p代表低层电子轨道,sum代表所有轨道电子总和。

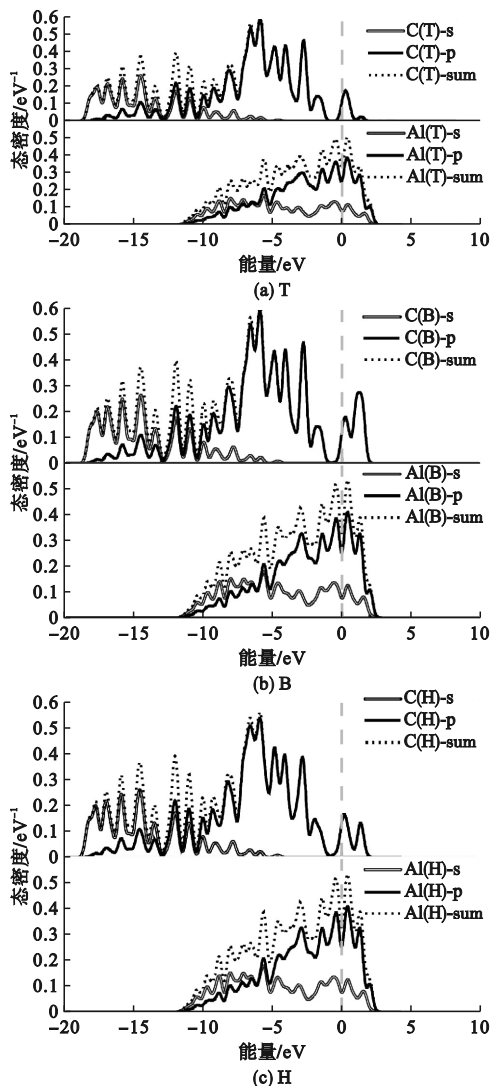


图9 Al/Gr界面各吸附位点的态密度

Fig. 9 Density of states at each adsorption site of the Al/Gr interface

由图9可知,Al原子与C原子的各轨道电子未出现重叠峰,表明Al原子与C原子间没有成键,与前述差分电荷密度结论一致。对比图9(a)~9(c)可以看出,三种不同点位的Al原子态密度分布基本一致,而C原子态密度受不同点位Al原子影响仅在0~2 eV之间,对整体态密度无明显贡献。说明Al原子的位置对于Al/Gr界面结合没有明显的影响作用。

Al原子吸附于石墨烯表面不同点位上的Mulliken键布居计算结果如表2所示。

表2 Al/Gr界面处Al各点位的Mulliken键布居
Table 2 Mulliken bond cloth residence for Al at various points at the Al/Gr interface

| 界面 | 成键 | 键布居 | 键长/Å |
|----|-----------|------|-------|
| T | C5—C6 | 1.04 | 1.545 |
| | C2—C7 | 1.04 | 1.547 |
| | Al3—Al27 | 0.27 | 2.666 |
| H | C5—C6 | 1.04 | 1.545 |
| | C2—C7 | 1.04 | 1.546 |
| | Al7—Al21 | 0.32 | 2.677 |
| B | C5—C6 | 1.04 | 1.545 |
| | C2—C7 | 1.04 | 1.546 |
| | Al17—Al24 | 0.30 | 2.676 |

由表2可知,Al原子吸附于石墨烯表面三种点位上的C—C键和Al—Al键的键长和电荷累积基本不变,这也表明Al/Gr界面相互作用以弱范德华力为主,与差分电荷密度分析的结论一致。

Al/Cu/Gr界面的态密度如图10所示,图中d代表低层电子轨道。Mulliken键布居计算结果如表3所示。

表3 Al/Cu/Gr界面处Cu各点位的Mulliken键布居
Table 3 Mulliken bond fabrication residence of Cu at each point at the Al/Cu/Gr interface

| 界面 | 成键 | 键布居 | 键长/Å |
|----|-----------|-------|-------|
| T | C3—C6 | 1.06 | 1.538 |
| | Al28—Cu2 | 0.36 | 2.504 |
| | Al21—Al28 | 0.48 | 2.663 |
| H | Al28—Cu1 | -0.15 | 2.603 |
| | Al28—Cu2 | -0.15 | 2.603 |
| | Al28—Cu3 | -0.15 | 2.603 |
| B | Al28—Cu1 | -0.12 | 2.595 |
| | Al28—Cu2 | -0.12 | 2.595 |
| | Al28—Cu3 | -0.12 | 2.596 |

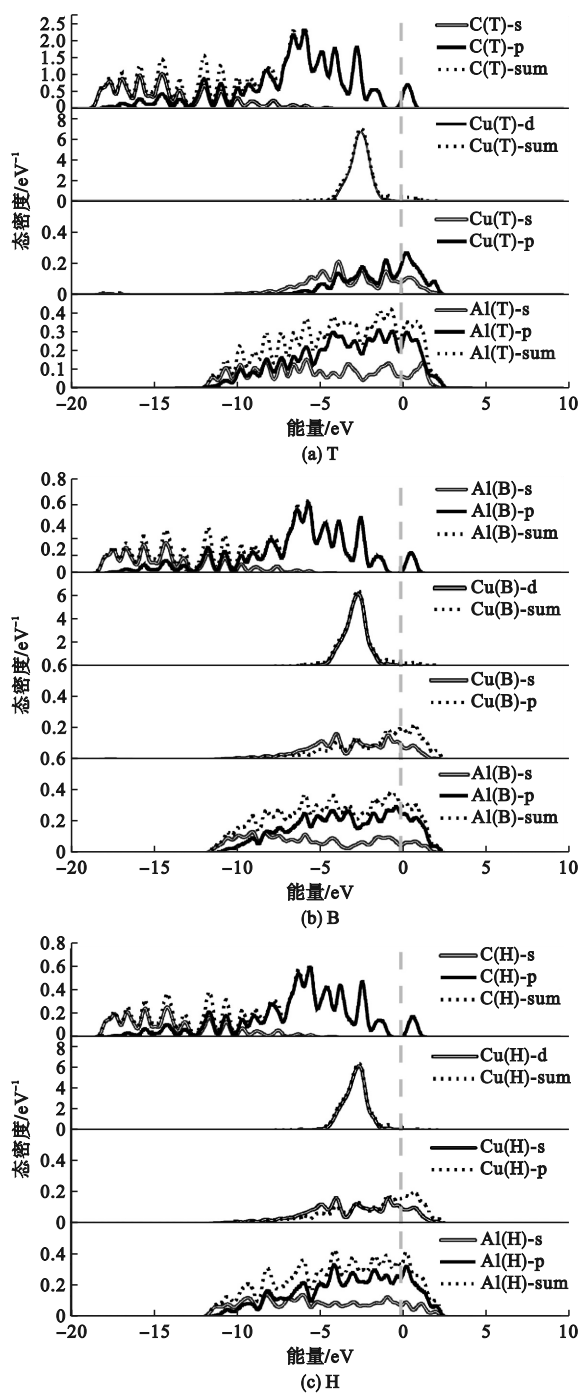


图 10 Al/Cu/Gr 界面各吸附点位的态密度

Fig. 10 Density of states at each adsorption site of the Al/Cu/Gr interface

由图 10 可知,Al 原子的 s、p 轨道与 Cu 原子的 s、p、d 轨道的电子在 $-5 \sim 3$ eV 范围内发生 sp、pd 和 sd 杂化,形成 Al—Cu 键。表 3 也证实了 Al 原子与 Cu 原子间出现了电荷转移。此外,C 原子在优化前后电子态密度变化较小,表明 C 原子未与 Cu、Al 原子成键。

对比图 10(a) ~ 10(c) 可见,B、H 相对于 T 其界面处 Al、Cu 原子态密度存在明显的变化,Al

与 Cu 原子的电子态密度在 $-5 \sim 3$ eV 范围内出现更大面积的杂化峰,证实了 Al-Cu 轨道杂化程度的显著增强,而 C 原子电子态密度无明显变化。且由表 3 可知,Al/Cu/Gr 其 B、H 界面处一个 Cu 原子与多个 Al 原子成键,导致其界面结合强度显著高于顶位界面,这可通过黏附功的定量提升得以验证。同时 Al/Cu/Gr 桥位界面处比洞位界面处的 Cu-Al 键的键强更强、键长更短,这种结构-性能的强关联性最终使 Al/Cu/Gr 桥位界面体系呈现出最优的界面黏附特性

3 结论

采用第一性原理计算方法研究了 Cu 改性石墨烯/铝界面的机理,分析复合材料的界面结合性质、电子结构,得出以下结论。

1) 传统的石墨烯/铝复合材料中,Al 元素的顶位、桥位和洞位对界面结合强度影响不明显,而石墨烯/铝复合材料的界面经 Cu 改性后,其界面结合强度大幅提高,尤其 Cu 原子吸附在桥位和洞位时,界面结合强度提高幅度最明显。

2) Cu 元素吸附桥位和洞位时对于 Al 原子成键更多,因此界面黏附功显著高于顶位。桥位的 Al—Cu 键强高于洞位,呈现出最优的界面稳定性。综上,Cu 改性石墨烯/铝界面结合强度大小为:桥位 > 洞位 > 顶位。

参考文献 (References):

- [1] ZHOU J J, SHEN J, YUE W, et al. Molecular dynamics simulation of reinforcement mechanism of graphene/aluminum composites and microstructure evolution [J]. *Journal of Materials Research and Technology*, 2023, 23: 2147 - 2159.
- [2] ZHOU W W, CHEN C, MIKULOVA P, et al. Thermal expansion behaviors of few-layered graphene-reinforced Al matrix composites [J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2019, 792: 988 - 993.
- [3] BOPANA S B, DAYANAND S, ANIL KUMAR M, et al. Synthesis and characterization of nano graphene and ZrO₂ reinforced Al6061 metal matrix composites [J]. *Journal of Materials Research and Technology*, 2020, 9(4): 7354 - 7362.
- [4] 杜晓明, 迟清波, 王妍, 等. 石墨烯/铝复合材料制备工艺与性能研究 [J]. *沈阳理工大学学报*, 2024, 43(2): 58 - 63, 70.
- [5] DU X M, CHI Q B, WANG Y, et al. Study on the preparation process and properties of graphite film/aluminum composites [J]. *Journal of Shenyang Ligong University*, 2024, 43(2): 58 - 63, 70. (in Chinese)
- [6] ALAM M A, YA H B, AZEEM M, et al. Advancements in aluminum matrix composites reinforced with carbides and graphene: a comprehensive review [J]. *Nanotechnology Reviews*, 2023, 12(1): 20230111.

- [6] 林启民,崔建功,颜鑫,等.单点缺陷氧化石墨烯电子结构与光学特性的第一性原理研究[J].无机材料学报,2020,35(10):1117.
LIN Q M,CUI J G,YAN X,et al. First-principles study on electronic structure and optical properties of single point defect graphene oxide[J]. Journal of Inorganic Materials,2020,35(10):1117. (in Chinese)
- [7] CAO M,LUO Y Z,XIE Y Q,et al. The influence of interface structure on the electrical conductivity of graphene embedded in aluminum matrix[J]. Advanced Materials Interfaces,2019,6(13):1900468.
- [8] ZHOU T,LEI M,XU J. Recent progress in the development and properties of aluminum matrix composites reinforced with graphene:a review[J]. Materials Today Sustainability,2024,25:100674.
- [9] HUANG J T,LI M W,CHEN J Y,et al. Insights into the diffusion migration behavior of alloy atoms at the graphene/aluminum interface: First-principles calculations [J]. Surfaces and Interfaces,2023,38:102825.
- [10] 李岳,杜晓明,刘凤国. 石墨烯增强 6061 铝基复合材料的组织与力学性能研究[J]. 沈阳理工大学学报,2023,42(2):49-55.
LI Y,DU X M,LIU F G. Study on microstructure and mechanical properties of graphene-reinforced 6061 aluminum matrix composites[J]. Journal of Shenyang Ligong University,2023,42(2):49-55. (in Chinese)
- [11] SADHU K K,MANDAL N,SAHOO R R. SiC/graphene reinforced aluminum metal matrix composites prepared by powder metallurgy: a review [J]. Journal of Manufacturing Processes,2023,91:10-43.
- [12] SMYRAK B,GNIEŁCZYK M. Study of the effect of graphene content on the electrical and mechanical properties of aluminium-graphene composites [J]. Materials,2025,18(3):590.
- [13] LI J C,ZHANG X X,GENG L. Effect of heat treatment on interfacial bonding and strengthening efficiency of graphene in GNP/Al composites[J]. Composites Part A: Applied Science and Manufacturing,2019,121:487-498.
- [14] ZHENG Z,ZHANG X X,LI J C,et al. Achieving homogeneous distribution of high-content graphene in aluminum alloys via high-temperature cumulative shear deformation[J]. Materials & Design,2020,193:108796.
- [15] SU J L,TENG J. Recent progress in graphene-reinforced aluminum matrix composites[J]. Frontiers of Materials Science,2021,15(1):79-97.
- [16] WAKHI ANUAR N F B,SALLEH M S,OMAR M Z,et al. Wear properties of graphene-reinforced aluminium metal matrix composite:a review[J]. Reviews on Advanced Materials Science,2023,62(1):20220326.
- [17] HU Z R,TONG G Q,LIN D,et al. Laser sintered graphene nickel nanocomposites [J]. Journal of Materials Processing Technology,2016,231:143-150.
- [18] LIU P,XIE J P,WANG A Q,et al. First-principles prediction of enhancing graphene/Al interface bonding strength by graphene doping strategy [J]. Applied Surface Science,2020,517:146040.
- [19] HUANG J T,LIU Y,LAI Z H,et al. A systematic study of interface properties and fracture behavior of graphene/aluminum: Insights from a first-principles study [J]. Vacuum,2022,204:111346.
- [20] ZHANG X,WANG S Q. Interfacial strengthening of graphene/aluminum composites through point defects: a first-principles study[J]. Nanomaterials,2021,11(3):738.
- [21] HUANG J T,WANG K,LI M W,et al. Influence of alloy atoms on the electronic structure and interfacial properties of graphene/aluminum composites: Theoretical calculation and experimental verification[J]. Vacuum,2023,215:112253.
- [22] GIANNOZZI P,ANDREUSSI O,BRUMME T,et al. Advanced capabilities for materials modelling with quantum ESPRESSO[J]. Journal of Physics. Condensed Matter,2017,29(46):465901.
- [23] VANDERBILT D,RESTA R. Chapter 5 quantum electrostatics of insulators: polarization, wannier functions, and electric fields[J]. Contemporary Concepts of Condensed Matter Science,2006,2:139-163.
- [24] ENGEL E,CHEVARY J A,MACDONALD L D,et al. Asymptotic properties of the exchange energy density and the exchange potential of finite systems;relevance for generalized gradient approximations[J]. Zeitschrift Für Physik D Atoms, Molecules and Clusters,1992,23(1):7-14.
- [25] PERDEW J P,BURKE K,ERNZERHOF M. Perdew, burke, and ernzerhof reply [J]. Physical Review Letters,1998,80(4):891.
- [26] HILLIKER P R,HAKIM T M. Dynamic contribution of the Brillouin zone center to the floating transition of adsorbed monolayers[J]. The Journal of Chemical Physics,1990,93(3):2080-2081.
- [27] 燕绍九,杨程,洪起虎,等. 石墨烯增强铝基纳米复合材料的研究[J]. 材料工程,2014,42(4):1-6.
YAN S J,YANG C,HONG Q H,et al. Research of graphene-reinforced aluminum matrix nanocomposites [J]. Journal of Materials Engineering,2014,42(4):1-6. (in Chinese)
- [28] HU Z R,WU Z K,LUO S C,et al. Large scale production of graphene aluminum composites by stir casting: Process, microstructure and properties[J]. Journal of Materials Research and Technology,2023,27:681-691.
- [29] 陈春彩,陈源福. 过渡金属的能带结构与声子谱的第一性原理计算[J]. 山西大同大学学报(自然科学版),2019,35(2):17-20.
CHEN C C,CHEN Y F. First-principles calculation for band structure and phonon spectrum of transition metal[J]. Journal of Shanxi Datong University (Natural Science Edition),2019,35(2):17-20. (in Chinese)
- [30] 李宁,杜晓明,刘凤国. 石墨烯镀铜对铝基复合材料结构与性能的影响[J]. 沈阳理工大学学报,2021,40(4):73-77,87.
LI N,DU X M,LIU F G. Study on the effect of copper plating on graphene on the structure and properties of aluminum matrix composites[J]. Journal of Shenyang Ligong University,2021,40(4):73-77,87. (in Chinese)

(责任编辑:徐淑姣)