DOI：10.13334/j.0258-8013.pcsee.241285 文章编号：0258-8013 (2025) 24-9776-11 中图分类号：TM 561；TB 332 文献标识码：A

石墨烯/铜基电磁发射轨道摩擦磨损性能的分子动力学模拟

王健[1]，李鸿剑[1]，邢泽西[1]，韩智云[2*]，任瀚文[1]，李庆民[1]

(1. 新能源电力系统国家重点实验室(华北电力大学)，北京市 昌平区 102206;
2. 山东大学电气工程学院，山东省 济南市 250061)

Molecular Dynamics Simulation of Friction and Wear Properties of Graphene/Copper Based Electromagnetic Launcher Rail

WANG Jian[1], LI Hongjian[1], XING Zexi[1], HAN Zhiyun[2*], REN Hanwen[1], LI Qingmin[1]

(1. State Key Lab of Alternate Electrical Power System with Renewable Energy Sources
(North China Electric Power University), Changping District, Beijing 102206, China;
2. School of Electrical Engineering, Shandong University, Jinan 250061, Shandong Province, China)

ABSTRACT: Electromagnetic launch armature-rail interfaces often undergo severe mechanical friction under high-speed relative motion, leading to significant wear and failure of metallic rail materials. Graphene (Gr), as a novel self-lubricating material, has been widely used to enhance the performance of metal matrix composites. However, the microscopic mechanism of Gr in improving the anti-friction and wear resistance of copper-based electromagnetic rails remains unclear. In this study, a copper-based graphene composite (CuGr) model is developed by using molecular dynamics simulations. The model is implemented in LAMMPS to calculate friction coefficients under varying graphene layer counts and indentation depths. The dynamic evolution of the microstructure is analyzed to clarify the mechanisms by which graphene enhances the friction and wear performance of the copper matrix. Experimental results confirm the lubricating effect of graphene. The findings demonstrate that graphene doping significantly improves the frictional performance of the copper matrix, with a marked reduction in wear and a decrease in friction coefficient as the number of graphene layers increases. Specifically, the friction coefficients of the single-layer, double-layer, and triple-layer CuGr models are reduced by 37.06%, 42.94%, and 54.69%, respectively, compared to pure copper. The introduction of graphene helps address the mechanical performance degradation caused by friction at the armature-rail interface during electromagnetic launch. The performance enhancement mechanism of Gr/Cu composites is attributed to the layered structural support and dislocation blocking. These results provide theoretical guidance and technical support for the optimized design and performance enhancement of graphene/copper-based composites.

KEY WORDS: electromagnetic launch; copper-graphene; friction wear; molecular dynamics simulation; self-lubrication

摘要：电磁发射枢轨界面往往承受高速相对运动下的强机械摩擦，金属轨道材料磨损失效严重。石墨烯(graphene，Gr)作为一种新型自润滑材料被广泛用于提高金属基复合材料性能，但目前 Gr 对铜基电磁轨道抗摩擦耐磨损性能的微观机制尚不清晰。该文利用分子动力学方法建立铜基石墨烯复合材料(CuGr)模型，基于该模型在 LAMMPS 下计算不同 Gr 掺杂层数及不同压入深度下的摩擦系数，通过微观结构动态演变过程分析 Gr 提升铜基体摩擦磨损性能的机制，并经实验验证 Gr 的减摩润滑效果。结果表明：Gr 的掺杂能够有效提高 Cu 基体的摩擦性能，Cu 基体的磨损量显著降低，且摩擦系数随 Gr 掺杂层数的增加而下降，单层、双层、三层 CuGr 模型的摩擦系数相较于 Cu 分别下降了 37.06%，42.94%，54.69%。石墨烯的引入有助于解决枢轨界面在电磁发射过程中由于摩擦引起的机械性能下降问题，石墨烯 CuGr 复合材料的性能增强机制为层状结构支撑作用与位错阻断。研究结果可为石墨烯/铜基复合材料的优化设计与性能提升提供一定理论指导和技术支撑。

关键词：电磁发射；铜基石墨烯；摩擦磨损；分子动力学模

基金项目：国家自然科学基金项目(92266109，52207153)；中央高校基本科研业务费专项资金项目(2023JC005)；北京市自然科学基金项目(3232053)。

Project Supported by National Natural Science Foundation of China (92266109, 52207153); Fundamental Research Funds for the Central Universities (2023JC005); Beijing Natural Science Foundation (3232053).

拟；自润滑

0　引言

电磁发射轨道装置是一种利用电磁力将铝电枢推进并发射出膛的电磁加速装备[1]。在脉冲电流驱动下，电枢在两轨道之间加速运动并产生滑动电接触，轨道处于超高温与强电流环境当中[2]，加之电枢与轨道之间的高速相对运动，轨道不可避免地受到电气磨损和机械磨损[3]。其中，电气磨损主要集中于发射末端膛口以及由膛内外气压差导致的回膛电弧烧蚀过程。而电枢在轨道内运行过程中，枢轨界面相对运动导致的机械磨损占据主导作用，给轨道寿命与发射性能造成不可逆的损伤[4]，因此对导轨材料的抗摩擦耐磨损性能提出了极为苛刻的要求。

目前普遍研究的导轨材料为铜及其合金，因其具有良好的导电导热性能而被广泛应用于各类发射装置中[5]。然而，随着电磁发射不断向更高速度、更远距离等级发展，对轨道的机械性能的要求也在逐步提高。多次重复发射后，轨道材料的耐磨损能力与服役寿命大大下降[6]，现有的铜基轨道材料已无法满足电磁发射的应用需求。因此寻求提高其抗摩擦耐磨损性能的有效途径已成为目前亟待研究的问题。

石墨烯(graphene，Gr)是碳的同素异形体，是由 sp^2 杂化键合碳原子堆积形成的单层六边形蜂窝晶格结构，因具有出色的电、热、力学特性而在复合材料增强与微纳加工领域获得了广泛关注[7]。石墨烯的特性与铜性质相契，是铜基复合材料的理想增强体[8]，其层状结构能显著提升材料力学性能，铜基石墨烯两相界面间的力学性能研究对于第二相物质发挥增强效果机理有着重要指导作用。

Mai 等[11]通过第三相修饰石墨烯/铜复合材料研究发现，当石墨烯质量分数为 2%时，摩擦系数低至 0.2，摩擦过程中复合材料表面形成致密润滑碳层，减少了界面间磨损。张一凡等[12]通过对石墨烯铜基复合材料显微组织和性能的研究得出，随石墨烯含量增加，复合材料屈服强度上升，抗摩擦性能增强。上述研究证明了石墨烯掺杂的减摩效果，但对于微观层面石墨烯提升铜基体摩擦性能的内在增强机理尚不明晰，极端工况下的石墨烯润滑效果有待进一步研究。

目前受到实验成本及现代光学与微观测量技术的限制，对石墨烯增强铜基复合材料摩擦性能的微观作用机制研究较少。随着计算机技术的飞速发展，分子动力学模拟逐渐成为研究纳米掺杂颗粒对金属基复合材料力学性能的主要方法[13]，能够提供原子和分子层面的详细信息，有助于理解材料在摩擦磨损过程中的微观机制[14]。Zhang 等[15]通过分子动力学方法研究了石墨烯体系自润滑机理；研究可知，石墨烯层间作用形成范德华间隙，减弱相对运动阻碍，达到润滑的效果。Bian 等[16]为揭示石墨烯对于摩擦性能的影响效果，通过分子动力学方法模拟了纳米压头在裸铜和包覆石墨烯的复合材料表面的摩擦行为，对比摩擦效果得出，石墨烯涂层具有较强的减摩作用。Duan 等[17]研究石墨烯层数影响复合材料力学性能的微观作用机制；结果表明，相同条件下双层石墨烯的复合材料强度更高。

目前对于石墨烯增强铜基复合材料的研究虽取得了一定进展，但相关研究主要集中于金属材料的宏观力学行为与塑性形变机制，而材料界面处各项力学性能及石墨烯掺杂后的原子作用机制研究略显不足，并且现有的仿真较少关注高速电磁发射的极端工况下，铜基石墨烯轨道材料能否保持良好的摩擦磨损性能。

本文基于分子动力学模拟，针对铜基石墨烯复合材料摩擦过程，构建铜基石墨烯复合模型，模拟高速电磁发射轨道摩擦运动，计算并研究不同石墨烯层数、压入深度下模型受到的摩擦力、法向力及摩擦系数，并揭示石墨烯/铜基复合材料中潜在的摩擦磨损性能提升机制与自润滑机理。从微观结构演变与位错分析角度研究石墨烯铜基复合材料的增强机制，并经实验验证石墨烯掺杂后的减摩润滑效果，有助于解决电磁发射轨道由于高速重复发射引起的机械性能问题，为进一步指导设计高强度高性能的石墨烯/铜基电磁发射轨道材料，解决轨道磨损问题提供一定的机理技术参考。

1　模型构建与仿真条件

1.1　模型的构建

本文主要模拟研究铜基石墨烯复合材料在纳米尺度下的摩擦磨损行为，采用球形刚体压头对复合材料模型基体进行纳米划痕模拟摩擦磨损过程[18]，以便于分析并揭示石墨烯/铜基复合材料在微纳尺度下的摩擦行为及磨损机理[19]。

本文采用分子动力学模拟软件 LAMMPS 进行

分子动力学(molecular dynamics，MD)模拟。分子动力学模拟模型构建中，Cu 原子的晶体类型是面心立方(face centered cubic，FCC)，晶格常数为 3.61 Å。石墨烯结构稍复杂，首先应用 lattice custom 命令建模先找出晶体中的最小重复单元(原胞)，而后确定基矢及键长在所需维度上复制，将以上确定好的数据写入 lattice custom 代码，得到单层石墨烯模型如图 1 所示。

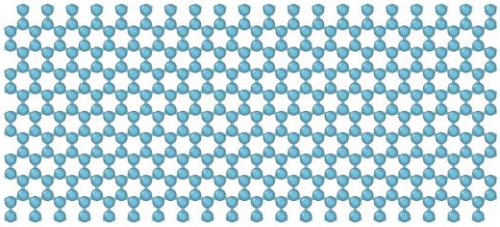


图 1 石墨烯层分子模拟模型

Fig. 1 Graphene layer molecular simulation model

摩擦磨损模型由基体和压头两部分组成，如图 2 所示，该模型是通过 ATOMSK 软件来构建的。上方半径 1.5 nm 的球形刚体虚拟压头，为完全不变形的刚体，无论施加的力多大，压头本身都保持其原有的形状和尺寸；下方立方体为 Cu 基体，基体尺寸为 8 nm×8 nm×8 nm，包含 48 095 个原子。基体模型包括 3 个原子层：红色区域为牛顿层；橙色区域为恒温层；蓝色区域为边界层，其作用分别为模拟原子运动、控温和固定支撑。为避免在摩擦模拟过程中下部基体产生滑移，底部边界层及恒温层保持不动[20]。

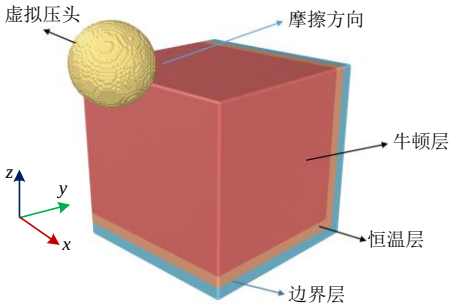


图 2 摩擦磨损模型示意图

Fig. 2 Schematic diagram of frictional wear model

为了研究不同 Gr 含量对 Cu 基体摩擦磨损性能的影响，建立 3 种石墨烯层数的铜基复合材料模型，下文分别称为单层、双层、三层的 CuGr 模型。其建模方法如下：利用 LAMMPS 软件根据研究尺寸需要，将构建的石墨烯层分子模拟模型在所需的维度上复制，搭建了不同层数纳米片堆叠石墨烯模型[21]。然后，将多层石墨烯模型与铜基体结合形成系列 CuGr 模型的构建方法，如图 3 所示。石墨烯层位于铜基体上表面，即 Cu 基体上表面覆盖单层 Gr，得到如图 3(a)中的单层 CuGr 模型。在铜基体上表面下方删除第 3、第 5 层相应区域的 Cu 原子并替换为组成石墨烯层的 C 原子，得到如图 3(b)、(c)中的双层 CuGr、三层 CuGr 模型。系列 CuGr 体系模型尺寸也为 8 nm×8 nm×8 nm，石墨烯质量分数分别为 1.012%、2.072%、3.260%，原子数分别为 48 155、48 347、48 728。C、Cu 原子替换过程密度变化导致模型原子数量些许差异，不影响后续仿真模拟的准确性。下文将这 3 种模型定义为系列 CuGr 模型，并结合摩擦磨损模型进行分子动力学模拟，在此基础上，计算并研究摩擦过程中的各项力学性能。

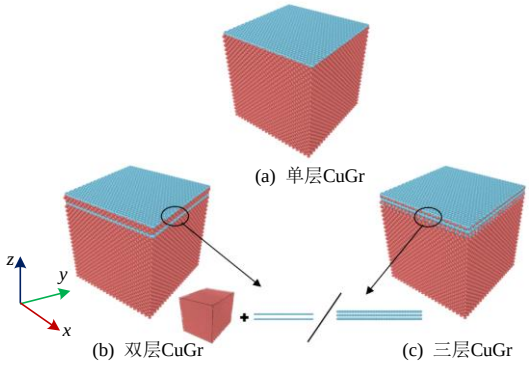


图 3 建模示意图

Fig. 3 Modeling diagram

1.2 势函数的选取

在 LAMMPS 分子动力学模拟中，势函数用于描述原子间的相互作用，定义了势函数一定程度上就确定了材料的基本性质[22]。因此，选择恰当的势函数能够保证分子模拟结果的准确性和可靠性。与传统采用的 LJ(Lennard-Jones)势不同，本文使用第二近邻修正嵌入原子法(second nearest-neighbor modified embedded-atom method，2NN MEAM)势，这种势函数能更精确地反映 Cu-C 相互作用的复杂性[23]。MEAM 势是嵌入式原子方法(embedded atom method，EAM)的扩展，基于密度泛函理论(density functional theory，DFT)的 Stott-Zaremba 推论，用于分析铜-石墨烯复合材料在不同晶体结构下的变形行为。

因此，Cu、C 原子间作用关系采用 2NN MEAN 势描述，系统总能量 E_{tot} 的表达式为

$$E_{\mathrm{tot}}=\sum_i[F_i(\bar{\rho}_i)+\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\phi_{ij}(R_{ij})] \tag{1}$$

式中：下标 i、j 分别代表不同的原子；F_i 为将原子 i 嵌入局部位置电子密度 ρ_i 的相关联的嵌入能；ϕ_{ij}

为原子 i、j 之间的对势；R_{ij} 为原子 i、j 之间的距离。其中电子密度 ρ_i 计算公式如下：

$$\rho_i = \sum_{j,j\neq i} f_j(r_{ij}) \tag{2}$$

式中 r_{ij} 为原子 i、j 之间的距离。

1.3　仿真条件设置

首先，在摩擦模拟前对模型体系初始结构进行几何优化与能量最小化。设置时间步长为 1 fs，在模拟开始之前对整个系统采用 NPT 系综弛豫 50 ps 以达到热力学平衡状态，得到摩擦模拟开始前的最终平衡构型。弛豫后的模型生成 data 文件作为后续仿真的起始数据文件。

模拟开始后，在 NVT 系综下进行模拟过程，首先利用 LAMMPS 中的 fix indent 命令，使压头与基体表面接触并压入一定的深度。实际的电磁发射过程是一个变加速运动过程，本文模拟离散化的某一瞬时运动阶段，可视为此阶段速率恒定。为模拟电磁发射高速极端工况，参考电枢典型发射速率 2 km/s[24]，在 y 方向上设置自由边界条件，控制压头与 CuGr 基体产生摩擦作用以相同恒定速率沿 y 方向滑动，摩擦距离为 8 nm。采用 Verlet 积分算法对摩擦过程中的运动方程进行处理以准确计算原子运动态，得出实时位置和速度，并以此计算输出摩擦过程中压头所受的载荷和摩擦力变化情况。模拟结果使用可视化软件 OVITO 进行分析。

2　计算方法

2.1　摩擦力与法向力

模拟过程如下：在模拟盒子当中插入一虚拟球形刚体压头，压头排斥所有接触它的原子，压头所受力 $F(s)$为

$$F(s) = -K(s-S)^2 \tag{3}$$

式中：K 为指定的力常数；s 为压头球心至原子中心距离；S 为压头半径长度。$s>S$ 时，$F(s)=0$。

压头沿 y 轴正方向前进，沿 Cu 或系列 CuGr 模型表面划动并摩擦基体，直至模拟边界为止。模拟过程中实时采集压头内部各原子受力，采集间隔步长为 100 步。将原子所受的 y 方向分力设为 F_{yi}，z 方向的分力设为 F_{zi}，则压头所受摩擦力 F_y 和法向力 F_z 分别为

$$\begin{cases} F_y = \sum_{i=1}^{n} F_{yi} \\ F_z = \sum_{i=1}^{n} F_{zi} \end{cases} \tag{4}$$

式中 n 为原子数。

为了更加直观地描述 Gr 的加入对于 Cu 模型基体摩擦性能的影响，引入摩擦力 F_y 与法向力 F_z 的比值，即摩擦系数 f，其表达式为

$$f = F_y/F_z \tag{5}$$

2.2　微观结构与位错

为方便对分子动力学模拟结果进行观察和分析，采用开源可视化工具软件 OVITO 研究模型内部原子结构类型及其运动变化轨迹。采用共同近邻分析方法(common neighbor analysis，CNA)准确识别各种配位结构的微观结构演变。如：面心立方、密排六方体(hexagonal close-packed，HCP)、体心立方 (body-centered cubic，BCC)、二十面体配位(icosahedral coordination，ICO)等[25]。为准确提取模型基体内部位错，采用位错提取算法(dislocation extraction algorithm，DXA)对模型内部产生的位错进行识别与分析。

3　结果分析与讨论

3.1　石墨烯掺杂层数对铜基石墨烯摩擦系数的影响

综合考虑模型整体尺寸及石墨烯覆盖率，并满足均匀应力分布，将压头压入深度设置为 d=6 Å，分别对 Cu 和系列 CuGr 模型进行摩擦模拟，并根据所得的摩擦力和法向力计算摩擦系数。其中，摩擦力与法向力的数量单位为 nN，摩擦系数为无量纲量。图 4 表示了当压入深度 d=6 Å 时，Cu 模型所受摩擦力(F_y)和法向力(F_z)随时间(T)的变化关系。

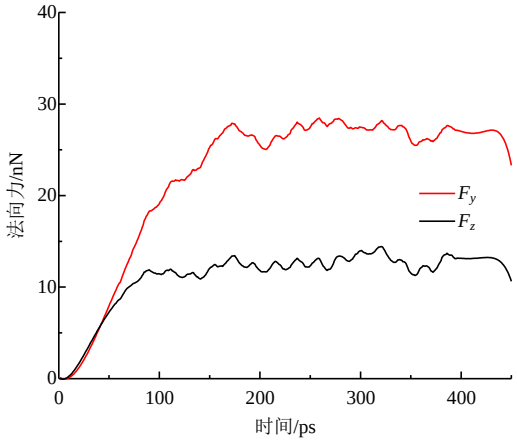


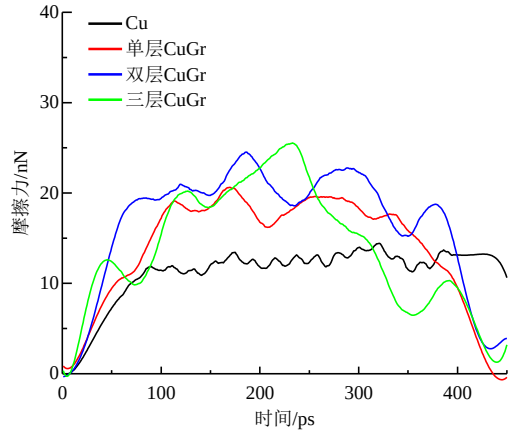
图 4　Cu 所受摩擦力(F_y)和法向力(F_z)随时间的变化关系

Fig. 4　Relationship between friction force(F_y) and normal force(F_z) of Cu and time

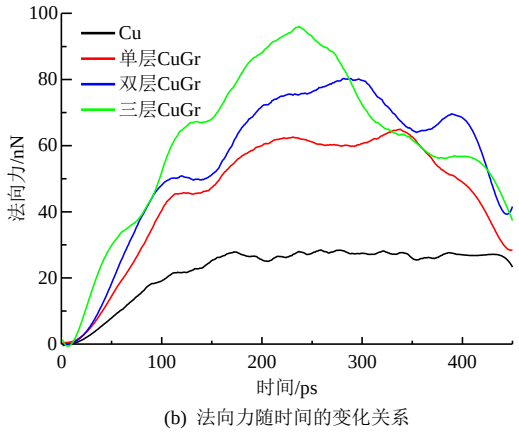
由图 4 可知，整个摩擦过程中，Cu 模型受到的法向力最大值为 29.22 nN。在摩擦初期(t=0~

150 ps 时)，随时间增加其法向力与摩擦力均逐渐增大。这是因为在摩擦初期压头逐步深入基体，受到压头前方和下方原子的阻碍作用力逐渐增大。当 t=200~350 ps 时，法向力和摩擦力均趋于稳定状态，其值在一定范围内上下浮动。

为方便比较石墨烯掺杂对于模型性能的影响，将 Cu 和系列 CuGr 受力曲线置于同一图中。Cu 和系列 CuGr 模型摩擦过程中所受摩擦力和法向力随时间的变化关系如图 5 所示。



(a) 摩擦力随时间的变化关系



(b) 法向力随时间的变化关系

图 5 系列 CuGr 所受摩擦力、法向力随时间的变化关系

Fig. 5 Relationship between friction force and normal force of series CuGr and time

由图 5(a)可知，摩擦阶段 Cu 和系列 CuGr 所受摩擦力最大值依次为 15.18、21.13、24.78、25.73 nN。系列 CuGr 模型所受摩擦力曲线变化情况与 Cu 模型所受摩擦力曲线变化趋势基本一致。摩擦初期，二者所受摩擦力曲线偶有交错；摩擦稳定阶段(t=200~350 ps)，系列 CuGr 所受摩擦力均大于 Cu。当压入深度一定时 Gr 的加入使得 Cu 基体受到的摩擦力略微提升。由图 5(b)可知，摩擦过程中 Cu 和系列 CuGr 所受法向力最大值分别为 30.22、64.39、79.23、98.66 nN。系列 CuGr 所受法向力曲线均远高于 Cu，模型在垂直方向上承担了更大的受力。这是因为 Gr 具有超高的面内弹性模量，Gr 的面内拉应力对于相对运动具有较强的阻碍作用，且随着 Gr 掺杂层数的增加，法向力成倍增大。因此，多层 Gr 的加入可以显著提高 Cu 基体的法向承载能力。

图 6 为系列 CuGr 在压痕深度 d=6 Å 时，摩擦系数随时间变化关系。可知，摩擦系数在压头滑动初期数值较大，随后快速下滑，最后进入相对稳定状态。这是因为压头开始与基体接触时其附近区域产生摩擦热和塑性形变热导致的“焊接”现象，此时的摩擦系数甚至大于 1。相比于 Cu，掺杂石墨烯后的系列 CuGr 模型摩擦系数曲线始终位于 Cu 模型曲线下方。取 t=200~350 ps 为其稳定阶段，将此范围内各模型所受摩擦系数 f 取平均值进行统计比较，结果如表 1 所示。

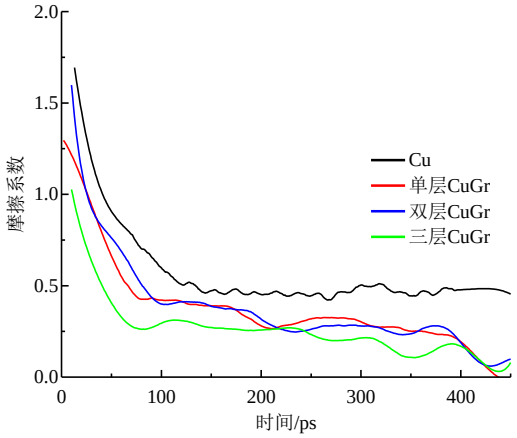


图 6 系列 CuGr 摩擦系数随时间的变化关系

Fig. 6 Relationship between friction coefficient of series CuGr and time

表 1 Cu 和系列 CuGr 所受摩擦系数(f)的平均值

Table 1 Average values of friction coefficient(f) of Cu and series of CuGr

材料	摩擦系数	下降百分比/%
Cu	0.467 6	—
单层 CuGr	0.294 3	37.06
双层 CuGr	0.266 8	42.94
三层 CuGr	0.211 9	54.69

由表 1 可知，系列 CuGr 的摩擦系数相比纯铜分别下降了 37.06%、42.94%、54.69%。随着石墨烯层数的增加，CuGr 模型的摩擦系数显著降低，这一结果得益于 Gr 本身超高的面内弹性模量。在一定范围内添加 Gr 层数越多，基体的承载能力越强。可知，石墨烯的掺杂能够有效减小铜基体的摩擦系数，但其并未直接显著减小模型所受摩擦力，而是从垂直方向上有效提升了模型法向承载力，从而达到减小摩擦系数的效果。

3.2　压入深度对铜基石墨烯摩擦磨损性能的影响

由上文分析可知，压入深度一定的情况下，多层石墨烯掺杂后模型所受的摩擦力并未显著降低。为进一步探究 Gr 提升摩擦性能的增强机理，改变压头压入深度，设置不同压入深度参数进行模拟。考虑到材料制备工艺及服役工况等因素限制，选择单层 CuGr 模型作为研究对象并在其基础上进行新的摩擦过程模拟，对压入深度分别为 d=0.6、0.8、1.0 nm 时 CuGr 模型的摩擦磨损情况进行研究。在不同压入深度下，单层 CuGr 模型所受摩擦力和法向力随时间的变化关系，如图 7、8 所示。

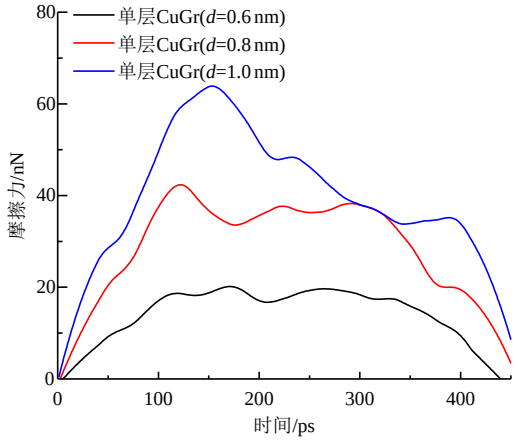


图 7　不同压深下单层 CuGr 所受摩擦力随时间的变化关系

Fig. 7　Relationship between friction force of single-layer CuGr and time at different depths

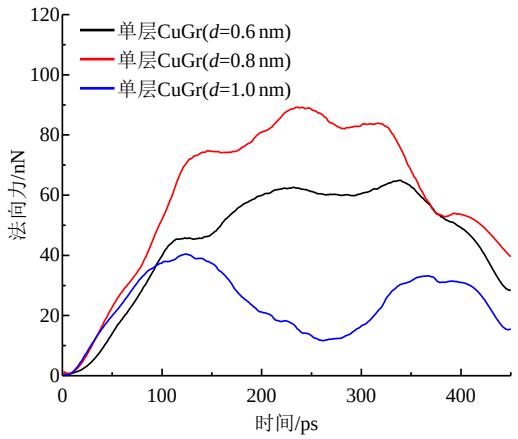


图 8　不同压深下单层 CuGr 所受法向力随时间的变化关系

Fig. 8　Relationship between normal force of single-layer CuGr and time at different depths

由图 7、8 可知，不同压入深度下，单层 CuGr 所受摩擦力的变化趋势大致相同。随着压入深度的逐渐增大，根据摩擦模型导出的摩擦力和法向力是随之增大的。但当压入深度增加到 1.0 nm 时，单层 CuGr 模型所受法向力在进入稳定阶段(t=200~350 ps)时，出现明显“塌陷”，为探究这一现象背后原因，以压入深度达到 d=1.0 nm 的情况为例，通过 OVITO 中的 DXA 模块和 CNA 模块进一步分析基体摩擦过程中表面形态及对应的磨损情况。

为进一步研究石墨烯掺杂对于铜基复合材料耐磨损性能的增强机理，并与后续宏观磨损实验相对照，在此明确分子动力学模拟中微观原子磨损的概念。磨损可视为模型基体原子脱离初始位置一定距离[26]，这一距离的设置与材料组成原子构型相关。在此模拟中将磨损原子指定为将脱离初始位置距离超过 5 Å，且高度大于 80 Å 的原子。磨损原子数目随移动距离改变，但不影响揭示磨损现象的本质。为方便观察摩擦后基体表面形貌及磨损原子分布，沿 z 方向对原子进行着色处理，着色区域为 75~ 85 Å，模拟过程如图 9 所示。由图 9 可知，在 150~ 200 ps 阶段，随着压头移动，磨损原子首先堆积在压头头部，而后磨损原子数目不断上升，黏附力不足维持其在压头前方，导致磨损原子随即逐渐流向两侧，如图 9 中红色原子所示。而在摩擦稳定阶段(t=200~350 ps 时)，磨损原子不断积累，压头前方与基体的接触面积增加，磨损原子之间黏附力变大，随滑动距离增加而溢出表面，主要堆积在压头前进方向四周，整个磨痕呈倒“U”形堆积[27]。

图 9 中蓝色部分原子为 Cu 基体表面覆盖的 Gr 层，Gr 层初始状态下为致密的六边形层状结构，原子间由碳碳键连接，在一定弹性范围内，碳原子之间的碳碳键不会发生断裂[27]。而当 175 ps 时，受压头移动摩擦，其下方 Gr 层开始出现断裂，碳原子在断裂处逐渐向外扩散，显露出下方红色部分的 Cu 原子。这一现象也解释了图 8 中压入深度 d=1.0 nm 的单层 CuGr 模型摩擦过程中所受法向力在 175 ps 时突然下降的原因。这是由于在初始摩擦阶段，压头压入基体表面一定深度，压头所受法向力迅速增加直至达到最大值。当压头下方 Gr 层出现断裂时，导致压头浸没入基体的部分与下方基体接触出现空隙，从而导致法向力的减小。这一现象与 LAMMPS 中 fix indent 命令的设置有关，压头的压入深度固定设置为 10 Å，由于 Gr 层破裂，压头无法始终与基体紧密接触，计算得出的法向力明显减小。因此，石墨烯增强铜基体摩擦性能在一定压入深度范围内能够起到良好的减摩效果，而当压入深度过大导致 Gr 层破裂时引起的机械性能下降问题还有待进一步研究。

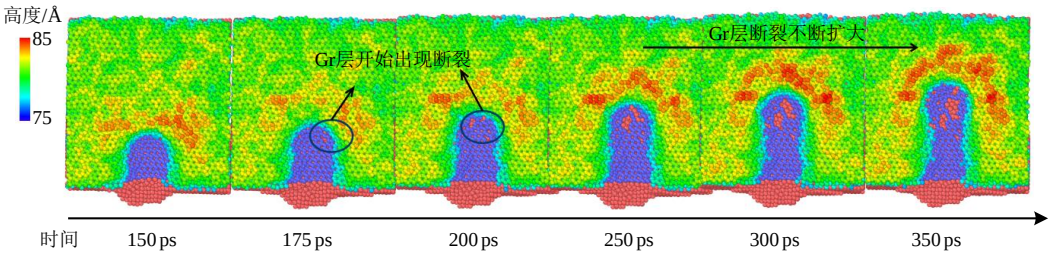
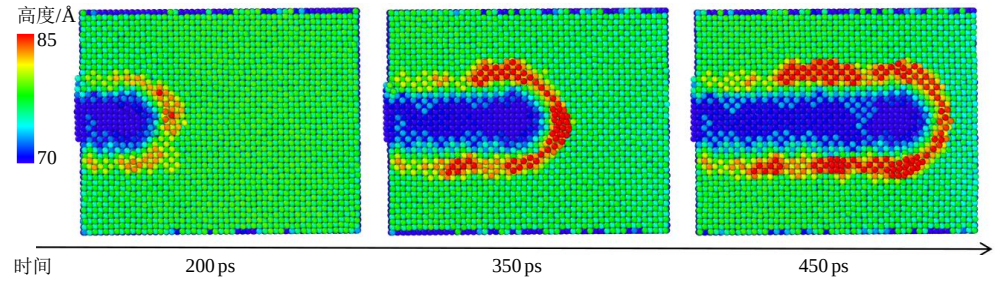


图 9　摩擦过程中模型的表面形貌及 Gr 层断裂过程

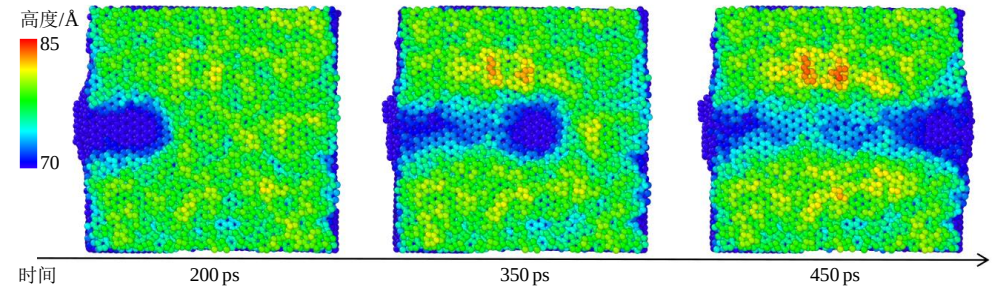
Fig. 9　Surface morphology of the model and the fracture process of the Gr layer during the friction process

3.3　摩擦过程中模型微观结构的动态演变

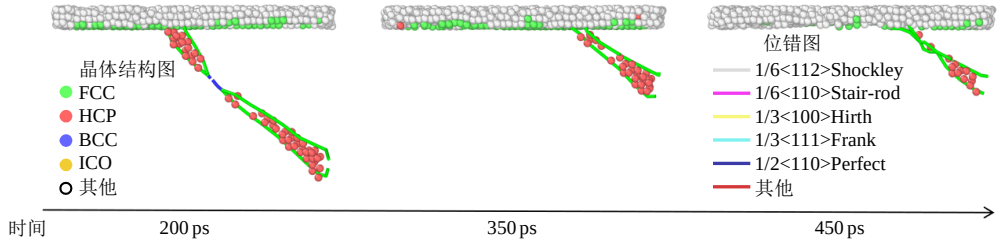
为从微观角度进一步研究 Gr 的加入对 CuGr 复合材料的强化机制，针对压入深度 d=0.6 nm 时的 Cu 模型和单层 CuGr 模型，采用 DXA 法和 CNA 法对摩擦过程接触塑性形变区域动态演变过程及位错和晶格结构产生转移进行了描述。图 10 为 Cu 和单层 CuGr 两种模型摩擦过程中微观结构动态演化示意图。以 200、350、450 ps 这 3 个时间点为例，其中模型表面形貌图为高度着色图，位错变化图展示模型的位错分布及晶格结构。为便于观察模型表面形貌变化，对基体上表面高度为 75~85 Å 区间原子进行了高度着色处理。



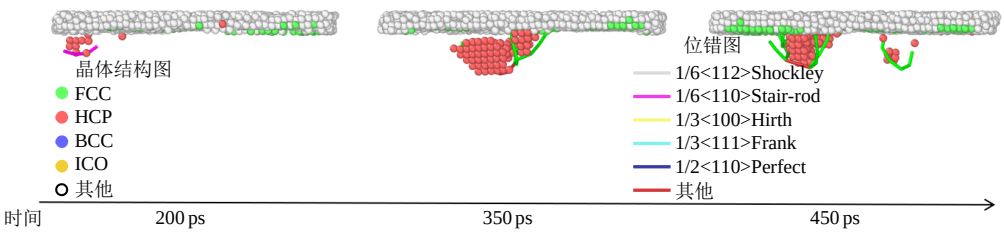
(a)　摩擦过程中 Cu 模型的表面形貌变化



(b)　摩擦过程中单层 CuGr 模型的表面形貌变化



(c)　摩擦过程中 Cu 模型的位错变化



(d)　摩擦过程中单层 CuGr 模型的位错变化

图 10　摩擦过程中两种模型的微观结构动态演化

Fig. 10　Dynamic evolution of the microstructure of two models in the friction phase

图 10(a)、(b)中，由两种模型摩擦过程的表面形貌观察分析可知，随着摩擦位移距离的增加，基体表面原子被压头推挤移向四周，形成磨痕，磨损原子溢出基体表面，磨损量不断上升。在摩擦距离相同的情况下，单层 CuGr 模型相比于 Cu 模型磨损原子上升高度降低。在 Cu 模型中，磨损原子集中在压头摩擦行进方向前部，并向两侧均匀分布，形成典型的“U”型磨痕。而当压头压入单层 CuGr 模型时，磨损原子更多地分布在压头行进方向的两侧。对比 Cu 模型和单层 CuGr 模型，Cu 模型的磨损原子数目远高于单层 CuGr 模型，这是因为 Cu 表面 Gr 层的添加，提高了模型整体的承载力，增强了铜基体抵抗变形能力，进而减小了溢出基体表面的磨损原子数目。

图 10(c)、(d)中，两种模型基体内部的主要位错为肖克莱不全位错。Cu 模型中含少量全位错，单层 CuGr 模型中则伴随少量梯杆位错。肖克莱不全位错、全位错及梯杆位错的 Burgers 矢量分别为 1/6<112>、1/2<110>和 1/6<110>，在图中位错参考示例以不同颜色进行区分。图 10(c)中，Cu 模型在 200 ps 时出现大量 HCP 结构伴随着位错显现，位错线较长且深入基体内部，这是由于摩擦初期压头与基体接触面积的增大引起了基体内强烈的结构改变。破坏程度不断加剧塑性形变，造成大量 HCP 结构形成无序堆垛。Cu 模型在 350 和 450 ps 时基体深层位错消失，位错线缩短，摩擦进入稳定阶段。结合图 10(b)、(d)分析可知，CuGr 模型中覆盖在 Cu 基体表面的 Gr 层始终完好无破裂，得益于石墨烯极强的表面作用力。图 10(d)中，CuGr 基体内部深层区域无明显位错，仅有少量位错和 HCP 结构位于压头与基体表面接触区域下方，这是由于石墨烯滑移面的层状结构有效地阻断了基体中的位错传播，分散了应力，增强了材料的整体强度和抗磨损性能。

3.4　铜基石墨烯复合材料的抗摩擦性能调控机制

铜基石墨烯复合材料在法向承载力和抗磨损能力方面显著优于未掺杂的铜基体材料，并且摩擦系数随着石墨烯层数的增加而显著降低。研究表明，随着压头压入深度的增加，铜基体及其系列铜基石墨烯复合材料的摩擦力亦随之增加。这是由于磨粒深入材料内部时，破坏了更多的基体晶格结构，导致阻力增加并产生更多位错。模型变形区域内位错的堆积增加了原子纵向位移阻力，从而增强了材料的变形抵抗力[28]。石墨烯具有超高的面内弹性模量[29]，在摩擦过程中能够承受较高的法向载荷而不破裂，保持结构完整形成稳定的润滑膜，减少了直接金属接触，从而降低磨损和摩擦系数。另一方面，石墨烯强大的表面作用力引起基体表面位错交织，交织的位错相互作用一定程度上阻断了基体中位错向下进一步传播，进一步增强了基体的强度和稳定性[30]。

3.5　铜基石墨烯复合材料的摩擦磨损实验

实验样品由合作单位提供，分别为纯铜与 CVD 单层石墨烯铜基底薄膜，后者制备工艺为化学气相沉积法。铜表面上的碳原子或团簇不断附着到成核位置最终链接成连续的石墨烯薄膜，再与铜基体结合获得单层 CuGr 复合材料。将样品置于摩擦磨损实验机进行纳米划痕实验，测试其摩擦磨损性能。实验条件：力的加载速度为 15 N/min，终止载荷为 15 N，测试时间为 1 min，划痕长度 5 mm，每件样品做 3 次实验，分别得到 3 处划痕。摩擦过程中实时输出载荷与摩擦力的变化情况，计算得出摩擦系数最终取其平均值，实验结束后采用扫描电子显微镜观察其表面形貌。

图 11 为 Cu 与单层 CuGr 材料的摩擦磨损实验数据计算得出的摩擦系数随时间变化曲线，其中 Cu 摩擦初期存在测量误差故摩擦系数异常升高部分数据无效。由有效部分实验数据计算得出的两种材料摩擦系数平均值如表 2 所示。由表 2 可知，在表层掺杂了石墨烯的单层 CuGr 样品较 Cu 样品摩擦系数下降了 24.54%，同表 1 中分子动力学模拟得到的单层 CuGr 摩擦系数下降 37.06%的结果相一致，取得了良好的减摩效果，可见石墨烯层的覆盖可以

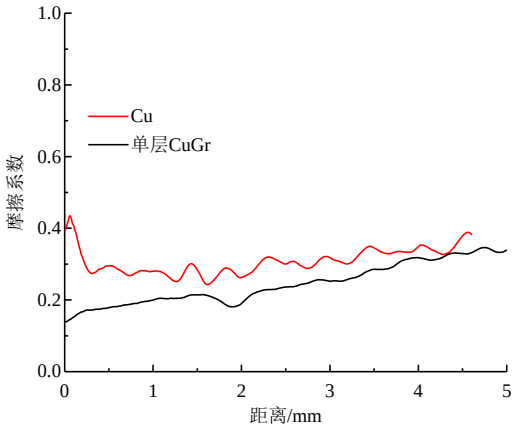


图 11　Cu 与单层 CuGr 的摩擦系数随摩擦距离的变化关系

Fig. 11　Relationship of friction coefficient of Cu and single-layer CuGr with friction distance

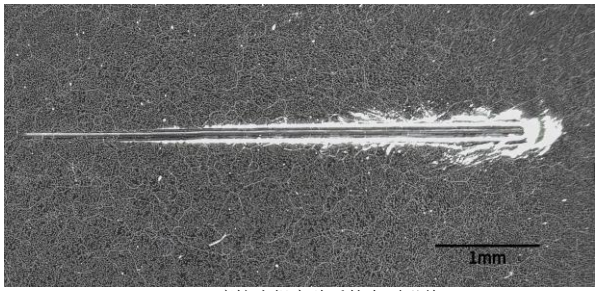
表 2 Cu 和单层 CuGr 摩擦磨损实验后的摩擦系数平均值

Table 2 Average values of friction coefficient of Cu and single-layer CuGr after friction and wear experiment

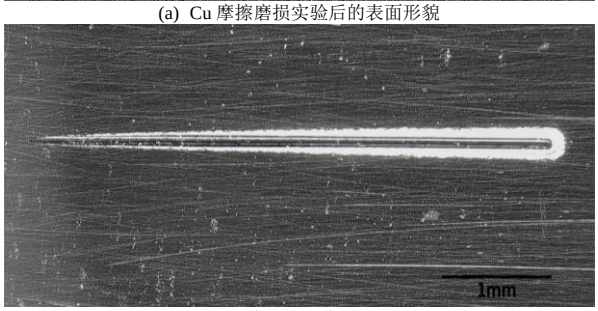
材料	摩擦系数	下降百分比/%
Cu	0.320 3	—
单层 CuGr	0.241 7	24.54

有效提高铜基体的摩擦性能。实验与仿真结果数值上的些许差别来源于纳米划痕深度的变化，压入深度的增加会导致摩擦力和法向力以及摩擦系数的增加，但摩擦系数衡量材料本身机械性能的本质不受影响，二者摩擦系数下降的趋势是一致的。

图 12 为 Cu 与单层 CuGr 材料摩擦磨损实验后的表面形貌。由图 12 可见，Cu 与单层 CuGr 样品经摩擦后都出现了明显的“U”型沟槽，Cu 表面划痕附近形貌由内向四周呈溅射状态，而石墨烯覆盖表面的单层 CuGr 材料经摩擦后相比于 Cu 拥有相对平滑的表面形态，较好地印证了图 10(a)、(b)中分子动力学模拟摩擦后的两种样品表面形貌。由此可见，石墨烯的引入可以有效降低 Cu 的磨损率，提升铜轨道的抗摩擦耐磨损性能。分子动力学模拟与实验结合提高了研究的全面性和准确性，有助于解决实际电磁发射轨道多次重复发射引起的磨损问题。



(a) Cu 摩擦磨损实验后的表面形貌



(b) 单层 CuGr 摩擦磨损实验后的表面形貌

图 12 两种材料摩擦磨损实验后的表面形貌

Fig. 12 Surface morphology of two materials after friction and wear experiment.

4 结论

本文基于分子动力学构建了材料摩擦磨损模型和不同石墨烯层数的 CuGr 复合模型，通过 LAMMPS 进行摩擦磨损模拟，得到不同石墨烯层数和不同压入深度下各模型所受摩擦力与法向力并计算摩擦系数，结合实验与仿真通过摩擦过程中的微观结构动态变化揭示石墨烯对提升铜基体摩擦性能的润滑机理与增强机制，得出以下结论：

1）石墨烯掺杂能够显著降低铜基复合材料的摩擦系数，单层、双层和三层石墨烯的加入使摩擦系数较纯铜分别下降 37.06%、42.94%和 54.69%。但当压入深度达到一定深度时，覆盖在 Cu 基体表面的 Gr 层将会发生破裂，其对摩擦性能的提升将大大降低。

2）CuGr 复合材料摩擦性能的增强机制在于石墨烯对微观位错演化行为的影响。CuGr 复合材料自润滑特性来源于其晶体结构的滑移面，同时石墨烯层有效阻断位错传播，有效降低 Cu 的磨损量，进一步增强了基体的强度和稳定性。

3）通过纳米划痕实验和扫描电子显微镜分析验证了石墨烯的润滑减摩作用，实验结果与分子动力学模拟趋势一致。结果表明所提出的分子动力学模型可为石墨烯/铜基电磁发射轨道材料的制备与优化设计提供准确预测，研究成果可为高性能材料的设计与应用提供新思路。

参考文献

[1] 马伟明，鲁军勇. 电磁发射技术[J]. 国防科技大学学报，2016，38(6)：1-5.
MA Weiming，LU Junyong. Electromagnetic launch technology[J]. Journal of National University of Defense Technology，2016，38(6)：1-5(in Chinese).

[2] 苏子舟，国伟，张涛，等. 电磁轨道炮技术[M]. 北京：国防工业出版社，2019：12-13.
SU Zizhou，GUO Wei，ZHANG Tao，et al. Electromagnetic railgun technology[M]. Beijing：National Defense Industry Press，2019：12-13(in Chinese).

[3] 惠阳，刘贵民，闫涛，等. 载流摩擦磨损研究现状及展望[J]. 材料导报，2019，33(7)：2272-2280.
HUI Yang，LIU Guimin，YAN Tao，et al. Research status and prospect of current-carrying friction and wear[J]. Materials Reports，2019，33(7)：2272-2280(in Chinese).

[4] 刘峰，赵丽曼，张晖辉，等. 电磁轨道炮刨削的形成机理及仿真分析[J]. 高压物理学报，2015，29(3)：199-205.
LIU Feng，ZHAO Liman，ZHANG Huihui，et al. Formation mechanism and simulation analysis of railgun gouging[J]. Chinese Journal of High Pressure Physics，2015，29(3)：199-205(in Chinese).

[5] CHEN T，LONG X，DUTTA I，et al. Effect of current crowding on microstructural evolution at rail-armature contacts in railguns[J]. IEEE Transactions on Magnetics，

2007，43(7)：3278-3286.

[6] 李白，鲁军勇，谭赛，等. 滑动电接触界面粗糙度对电枢熔化特性的影响[J]. 电工技术学报，2018，33(7)：1607-1615.
LI Bai，LU Junyong，TAN Sai，et al. Effect of interfacial roughness of sliding electrical contact on the melting characteristics of armature[J]. Transactions of China Electrotechnical Society，2018，33(7)：1607-1615(in Chinese).

[7] LEE C，WEI Xiaoding，KYSAR J W，et al. Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene[J]. Science，2008，321(5887)：385-388.

[8] ZHANG Lei，DUAN Zhengkang，ZHU Hongwen，et al. Advances in synthesizing copper/graphene composite material[J]. Materials and Manufacturing Processes，2017，32(5)：475-479.

[9] 赵亚茹，李勇，李焕. 石墨烯增强铜基复合材料的研究进展[J]. 表面技术，2016，45(5)：33-40.
ZHAO Yaru，LI Yong，LI Huan. Research progress of graphene reinforced copper matrix composites[J]. Surface Technology，2016，45(5)：33-40(in Chinese).

[10] 蒲吉斌，王立平，薛群基. 石墨烯摩擦学及石墨烯基复合润滑材料的研究进展[J]. 摩擦学学报，2014，34(1)：93-112.
PU Jibin，WANG Liping，XUE Qunji. Progress of tribology of graphene and graphene-based composite lubricating materials[J]. Tribology，2014，34(1)：93-112(in Chinese).

[11] MAI Y J，CHEN F X，LIAN W Q，et al. Preparation and tribological behavior of copper matrix composites reinforced with nickel nanoparticles anchored graphene nanosheets[J]. Journal of Alloys and Compounds，2018，756：1-7.

[12] 张一凡，梁宇，刘永琪，等. 石墨烯增强铜基复合材料显微组织和性能的研究[J]. 铸造技术，2024，45(1)：88-93.
ZHANG Yifan，LIANG Yu，LIU Yongqi，et al. Microstructure and properties of graphene reinforced copper matrix composites[J]. Foundry Technology，2024，45(1)：88-93(in Chinese).

[13] 丁咪，邹亮，张黎，等. 功能化掺杂对交联环氧树脂/碳纳米管复合材料热力学性能影响的分子动力学模拟[J]. 电工技术学报，2021，36(23)：5046-5057.
DING Mi，ZOU Liang，ZHANG Li，et al. Molecular dynamics simulation of the influence of functionalized doping on thermodynamic properties of cross-linked epoxy/carbon nanotube composites[J]. Transactions of China Electrotechnical Society，2021，36(23)：5046-5057(in Chinese).

[14] KUMAR S，RAJPUT A，PAUL K S，et al. Friction and wear study of metallic contacts under dry sliding conditions：a molecular dynamics simulation-based approach[J]. Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers，Part J：Journal of Engineering Tribology，2024，238(6)：653-661.

[15] ZHANG Jie，XU Qiang，GAO Lei，et al. A molecular dynamics study of lubricating mechanism of graphene nanoflakes embedded in Cu-based nanocomposite[J]. Applied Surface Science，2020，511：145620.

[16] BIAN Jianjun，NICOLA L. On the lubrication of rough copper surfaces with graphene[J]. Tribology International，2021，156：106837.

[17] DUAN Ke，ZHU Fulong，TANG Kai，et al. Effects of chirality and number of graphene layers on the mechanical properties of graphene-embedded copper nanocomposites [J]. Computational Materials Science，2016，117：294-299.

[18] 柳培，韩秀丽，孙东立，等. 材料摩擦磨损分子动力学模拟的研究进展[J]. 材料科学与工艺，2017，25(3)：26-34.
LIU Pei，HAN Xiuli，SUN Dongli，et al. Research progress in the application of molecular dynamics simulation in the frictional wear of materials[J]. Materials Science & Technology，2017，25(3)：26-34(in Chinese).

[19] LI Shifan，DONG Conglin，YUAN Chengqing，et al. Molecular dynamics simulation on performance modulation of graphene-modified polyethylene during friction process[J]. Polymers for Advanced Technologies，2022，33(10)：3479-3489.

[20] 尹念，张执南，张俊彦. 导电滑环 Au 涂层摩擦磨损行为的分子动力学模拟[J]. 摩擦学学报，2018，38(1)：108-114.
YIN Nian，ZHANG Zhinan，ZHANG Junyan. Molecular dynamics simulation of friction and wear behaviors of Au coating for conductive slip ring[J]. Tribology，2018，38(1)：108-114(in Chinese).

[21] 张金涛. 基于分子动力学模拟的多层氧化石墨烯力学性能的研究[D]. 武汉：武汉理工大学，2022.
ZHANG Jintao. Study on mechanical properties of multilayer grapheme oxide based on molecular dynamics simulation[D]. Wuhan：Wuhan University of Technology，2022(in Chinese).

[22] PLIMPTON S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics[J]. Journal of Computational Physics，1995，117(1)：1-19.

[23] AGRAWAL A，MIRZAEIFAR R. Copper-graphene composites；developing the MEAM potential and investigating their mechanical properties[J]. Computational Materials Science，2021，188：110204.

[24] WANG Jun，LI Baoming．Dynamic response and critical velocity of rails in electromagnetic rail launcher due to axial force[J]．IEEE Transactions on Plasma Science，2020，48(10)：3714-3719．

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

[26] BAI Lichun，SRIKANTH N，KORZNIKOVA E A，et al．Wear and friction between smooth or rough diamond-like carbon films and diamond tips[J]．Wear，2017，372-373：12-20．

[27] 华军，任旭亮，赵冬．基于分子动力学的石墨烯涂层铜基体摩擦性能研究[J]．应用力学学报，2021，38(4)：1485-1492．
HUA Jun，REN Xuliang，ZHAO Dong．Study on the friction performance of graphene coated copper based on molecular dynamics method[J]．Chinese Journal of Applied Mechanics，2021，38(4)：1485-1492(in Chinese)．

[28] 王权，庄宿国，刘秀波，等．铜镍合金滑动摩擦学行为的分子动力学模拟[J]．摩擦学学报，2023，43(9)：1046-1054．
WANG Quan，ZHUANG Suguo，LIU Xiubo，et al．Molecular dynamics simulation of sliding tribological behavior of Cu-Ni alloy[J]．Tribology，2023，43(9)：1046-1054(in Chinese)．

[29] LIN Jiahao，LI Peng，LIU Yingjun，et al．The origin of the sheet size predicament in graphene macroscopic papers[J]．ACS Nano，2021，15(3)：4824-4832．

[30] 高国强，王青松，何志江，等．界面氧化对碳-铜接触副电接触性能的影响[J]．中国电机工程学报，2023，43(21)：8502-8511．
GAO Guoqiang，WANG Qingsong，HE Zhijiang，et al．Influence of interface oxidation on the electrical contact properties of C-Cu contact pairs[J]．Proceedings of the CSEE，2023，43(10)：4022-4033(in Chinese)．

[31] 韩智云，任瀚文，王梦溪，等．石墨烯增强铜钨合金触头耐磨损性能的分子模拟[J]．中国电机工程学报，2023，43(10)：4022-4033．
HAN Zhiyun，REN Hanwen，WANG Mengxi，et al．Molecular simulation of anti-abrasion property of graphene-reinforced copper-tungsten alloy contacts[J]．Proceedings of the CSEE，2023，43(10)：4022-4033(in Chinese)．



王健

在线出版日期：2024-09-30。
收稿日期：2024-06-05。

作者简介：
王健(1985)，男，工学博士，主要从事电磁发射技术与电接触材料设计方面的研究工作，wangjian31791@ncepu.edu.cn；
*通信作者：韩智云(1995)，男，博士，主要从事高性能电工材料设计与评估方面的研究工作，hanzhiyun1995@163.com。

(**责任编辑** 胡琳琳)