

附件 3-1:

受理编号:

湖北省自然科学基金计划申报书

(青年项目)

项 目 名 称： 低维碳基宏观材料多级结构与本构模型关联研究

依 托 单 位： 武汉大学

项目负责人： 高恩来

联 系 电 话： 15210579154

申 请 日 期： 2018 年 10 月 20 日

湖北省科学技术厅

二〇一八年制

填 写 说 明

1. 《湖北省自然科学基金计划申报书》(以下简称申报书)一律用A4纸打印,字体为宋体小四号。

2. 申报书封面:

- (1) 项目名称: 应与申报书内页填写一致;
- (2) 依托单位: 应填写申报项目依托单位全称,并与依托单位一级法人公章一致;
- (3) 项目负责人: 填写项目申请人姓名;
- (4) 联系电话: 填写项目申请人有效通讯号码;
- (5) 申报日期: 填报申报书的日期;
- (6) 申报类型: 面上类基金项目下设一般面上项目(简称: 一般面上)、青年项目(简称: 青年)。

3. 依托单位:

- (1) 名称: 与封面项目依托单位(一级法人单位)一致;
- (2) 所在地区: 依托单位所在市、州名称;
- (3) 单位性质: 按以下名称及代码填写:

AA 事业型研究单位, AB 大专院校, BA 转制为企业的科研院所,

BM 高新技术企业, BN 其他单位;

(4) 通信地址: 写明依托单位所在省、市(区、县)、街道和门牌号码, 邮政编码;

(5) 联系电话和传真: 请注明长途电话区号。

4. 依托单位审查意见: 由项目依托单位的科技主管部门(如: 企

业研发部、院校科研处等)填写,要对申报书中的各栏目中的有关内容予以确认,并对该项目的意义、是否属于该行业的重点技术发展方向等问题提出具体审查意见,请勿简单填写“同意”。加盖项目依托单位一级法人公章。

5. 申报类型——按上述 2.(6)的要求选择填写。

指南分类——填写本项目研究内容对应《项目指南》中领域编号和研究方向编号;

指南分类:一、光电子信息领域;二、人口健康与医药领域;三、农业生物领域;四、新能源新材料领域;五、先进制造领域;六、资源与环境领域;七、数理科学领域。

6. 学科代码按 GB/T13745-92“学科分类与代码”表填写。A 表示一级学科、B 表示二级学科。

7. 湖北省重点实验室人员:仅填写由省科技厅批准建立的省重点实验室相关信息。其中非湖北省重点实验室固定人员填写“否”,其后“实验室名称”和“申请项目对应实验室内设研究方向”不填。

一、主要信息表

申报项目	申报种类	面上类		申报类型		一般面上 <input type="checkbox"/> 青年 <input checked="" type="checkbox"/>		
	指南分类	领域编号		七		学科方向编号	2	
	学科代码	A	学科名称	力学		B	学科名称	固体力学
			学科代码	130			学科代码	13015
	项目名称	低维碳基宏观材料多级结构与本构模型关联研究						
	主要内容 (不得超过120字)	材料微结构与宏观力学行为的关联特性是设计制备优异力学性能材料的理论基础。本项目拟通过耦合分子模拟、介观粗粒化方法与连续介质力学理论,对低维碳基宏观材料的多级微结构与本构模型进行关联研究,建立用于材料力学性能设计的多级微结构关联的本构模型。						
	预期成果	发表论文	3		其中SCI/EI		3	
		专利	1		其中发明专利		1	
		科技奖励	1		其中省部级以上奖励		1	
人才培养		2		其中省部级以上人才		1		
申请金额	5万元		起止年月		2019年01月至2020年12月			
项目申报人	姓 名	高恩来	性别	男 <input checked="" type="checkbox"/> 女 <input type="checkbox"/>	民族	汉	身份证号码	41272619901101205X
	电子信箱	enlaigao@whu.edu.cn				手 机		15210579154
	学 位	<input checked="" type="checkbox"/> 博士 <input type="checkbox"/> 硕士 <input type="checkbox"/> 其他				职 称		<input checked="" type="checkbox"/> 副高 <input type="checkbox"/> 其他
	湖北省重点实验室人员	是 <input type="checkbox"/> 否 <input checked="" type="checkbox"/>				实验室名称		湖北省力学示范试验教学中心
	申请项目对应实验室内设研究方向	复杂介质多尺度力学行为研究						
项目依托单位	单 位 名 称	武汉大学				所在地区		湖北省武汉市
	单 位 性 质	大专院校				代 码		707137123
	通 信 地 址 (邮 编)	湖北省武汉市武昌区武汉大学科学技术发展研究院 430072						
	科 研 处 负 责 人	侯祚勇				联系电话		027-68772105
	科 研 处 联 系 人	陈丹				联系电话		027-68772100
	Email 地址	chendan@whu.edu.cn				传 真		027-68776130
	开 户 银 行 名 称	中国银行武汉珞珈山支行				银 行 账 号		576857528447
	开 户 银 行 地 址	湖北省武汉市武昌区珞珈山武汉大学工学部 同城清算行号 846022						

二、经费预算

经费投入（万元）		新增投资经费支出预算（万元）			
科目	预算	科目	预算	占新增投资总额的比重（%）	支出理由及计算依据
一、新增投资	5	1. 人员费	0.5	10%	发放学生补助。
1. 申请省财政科技专项资金	5	2. 设备费	0.6	12%	配置 1 台电脑。
2. 单位自筹		3. 材料费	0.6	12%	实验耗材费用。
3. 其他		4. 燃料及动力费			
		5. 试验外协费	1.8	36%	实验表征；计算机时租赁。
		6. 基本建设费			
二、已投入资金		7. 会议费、差旅费、国际合作交流费	0.5	10%	包括学术交流和参加会议的费用。
		8. 出版/文献/信息传播/知识产权事务费	0.3	6%	文献资料费。
		9. 绩效支出	0.45	9%	
		10. 管理费	0.25	5%	
		11. 其它			
投入合计	5	支出合计	5		

(备注：1.绩效支出比例一般不超过财政拨款经费扣除设备购置费后的 40%；

2.管理费和其它费用总和不得超过财政拨款经费的 5%)

三、依托单位审查意见

依 托 单 位 审 查 意 见
<p>该申请针对的是微纳米尺度力学行为的研究项目，材料微结构与宏观力学性能的关联特性是固体力学研究的核心科学问题。该方面的基础研究是国家自然科学基金委设立的重点方向之一，属于湖北省近来重点支持的领域。该项目符合湖北省自然科学基金面向项目申报指南。项目立项依据充分，研究基础扎实，学术思想清晰，技术方案可行，建议予以支持。</p> <p>情况属实，同意推荐。</p> <p>我单位承诺已对申请人申请资格和填报内容真实性进行审查并承担相关法人责任。</p> <div>（依托单位一级法人公章） 年 月 日</div>

四、申报书编写提纲

1、研究目的、意义。重点阐述研究项目的创新性和科学价值（1000 字以内）。

碳纳米管 (CNT) 与石墨烯分别是碳原子以 sp^2 杂化轨道构筑的具有优异力学特性的一维和二维碳结构。近年来自下而上组装技术的兴起为构筑低维碳基宏观材料提供了条件。虽然对低维碳基宏观材料的研究取得了许多重要进展,但是它们的若干关键力学性能与其构筑单元相比还存在着巨大差距,例如 CNT 纤维和石墨烯组装膜的抗拉强度 ($<10\text{ GPa}$) 与其构筑单元的理想强度 ($>100\text{ GPa}$) 相比,还相差 1-2 个数量级 (图 1a)[1-3]。微纳尺度下材料微结构的演化规律是设计制备优异力学性能材料的理论基础[4]。中国科学院解思深院士、国家纳米中心张忠研究员、刘璐琪研究员、天津大学亢一澜教授、王建山教授等研究组基于电镜和拉曼技术开展了 CNT 纤维与石墨烯组装膜的原位力学拉伸测试与理论分析工作[5-9]。清华大学徐志平教授、西安交通大学刘益伦教授与北京大学韦小丁研究员等研究组将考虑了构筑单元面内变形的剪滞理论应用于石墨烯层状结构和 CNT 束状结构的力学行为研究[10, 11], 促进了石墨烯组装膜与 CNT 纤维层/束结构对材料力学性能影响的理解[10-13]。除层/束结构外, 低维碳结构在组装过程中还会形成更多复杂微结构 (图 1b-c)。以 CNT 纤维为例, 在 CNT 阵列生长过程中, 会产生空位、拓扑缺陷等微结构, 在组装过程中, 由于范德华作用 CNT 易局部聚集成束, 而管束之间又存在交汇、分叉现象, 呈现出多级结构的特征。申请人前期采用理论计算和代表性体积单元等细观力学方法开展了多尺度力学行为分析, 揭示了低维碳基宏观材料多级结构变形失效特征, 但尚未建立微结构关联的本构模型[14]。目前亟需在前期低维碳基宏观材料力学行为研究的基础上, 根据材料复杂结构建立普适、定量的多级微结构关联的本构理论。从材料变形的微观机制出发来研究本构关系, 深入认识材料变形和运动的本质, 同时避免在本构关系中引入一些非必要、物理意义不明确的材料参数。

本项目拟以低维碳基宏观纤维、薄膜为研究对象, 结合材料多级微观结构表征与宏观力学行为测试, 通过分子模拟、介观粗粒化方法与多尺度连续介质力学

理论对低维碳基宏观材料的多级微结构与本构关系进行定量关联研究。拟通过引入能够表征多级微结构特征的内变量，描述经过统计平均处理的微观量与细观特征的分布与演化规律，建立微结构关联的本构理论，为低维碳基宏观材料的优异力学性能设计提供理论基础。

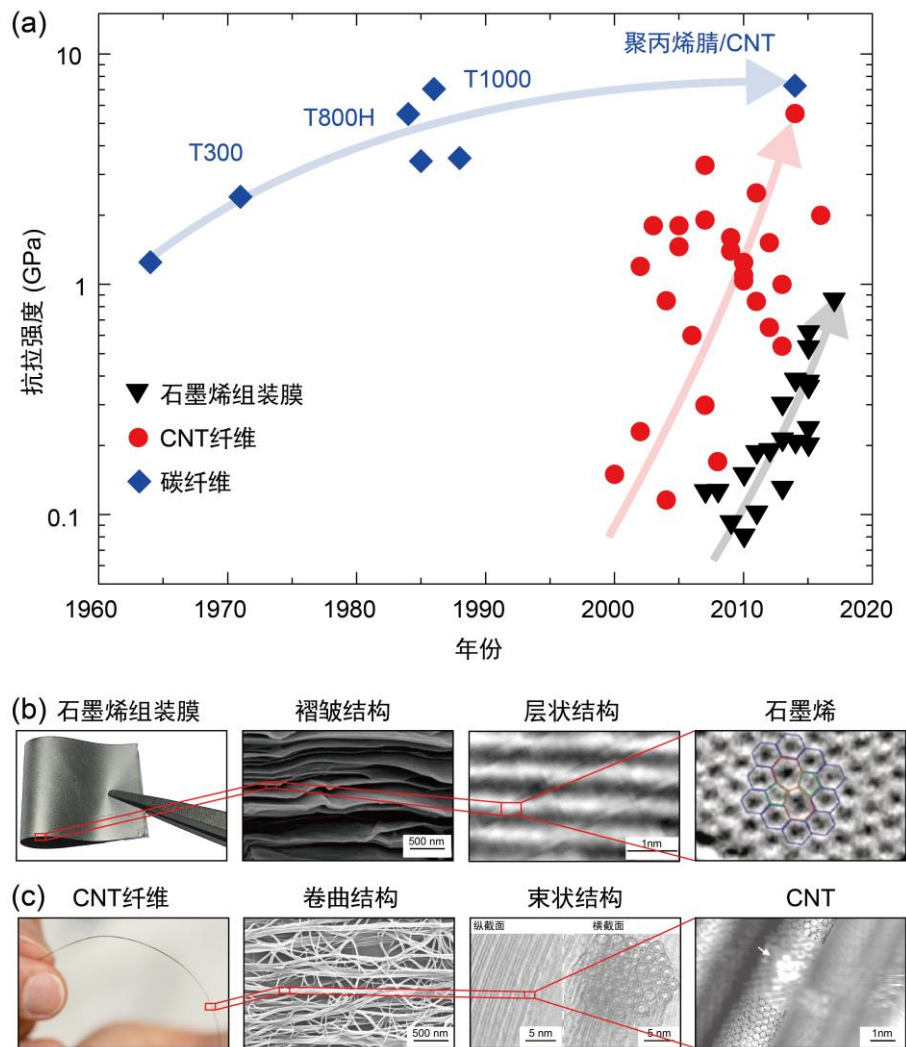


图 1 (a) 石墨烯组装膜、CNT 纤维与碳纤维强度发展趋势比较。(b) 石墨烯组装膜和 (c) CNT 纤维的三级结构 (第一级：石墨烯/CNT，第二级：层状/束状结构，第三级：褶皱/卷曲结构) [3, 15-58]。

参考文献：

1. Liu, L., et al., Macroscopic carbon nanotube assemblies: Preparation, properties, and potential applications. Small, 2011. 7(11): p. 1504-1520.

2. Greil, P., Perspectives of nano-carbon based engineering materials. *Adv. Eng. Mater.*, 2015. **17**(2): p. 124-137.
3. Lu, W., et al., State of the art of carbon nanotube fibers: Opportunities and challenges. *Adv. Mater.*, 2012. **24**(14): p. 1805-1833.
4. 黄筑平, 连续介质力学基础. 2012, 北京: 高等教育出版社.
5. Ma, W., et al., High-strength composite fibers: Realizing true potential of carbon nanotubes in polymer matrix through continuous reticulate architecture and molecular level couplings. *Nano Lett.*, 2009. **9**(8): p. 2855-2861.
6. Ma, W., et al., Monitoring a micromechanical process in macroscale carbon nanotube films and fibers. *Adv. Mater.*, 2009. **21**(5): p. 603-608.
7. Wang, G., et al., Tuning the interfacial mechanical behaviors of monolayer graphene/pmma nanocomposites. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2016. **8**(34): p. 22554-22562.
8. Rong, Q.Q., et al., A damage mechanics model for twisted carbon nanotube fibers. *Acta Mech. Solida Sin.*, 2012. **25**(4): p. 342-347.
9. Deng, W.L., et al., Multi-scale experiments and interfacial mechanical modeling of carbon nanotube fiber. *Exp. Mech.*, 2013. **54**(1): p. 3-10.
10. Liu, Y.L., et al., Mechanical properties of graphene papers. *J. Mech. Phys. Solids*, 2012. **60**(4): p. 591-605.
11. Wei, X., et al., Optimal length scales emerging from shear load transfer in natural materials: Application to carbon-based nanocomposite design. *ACS Nano*, 2012. **6**(3): p. 2333-2344.
12. Zhang, Z.Q., et al., Ultra-strong collagen-mimic carbon nanotube bundles. *Carbon*, 2014. **77**: p. 1040-1053.
13. Zhang, Z.Q., et al., Mechanical properties of unidirectional nanocomposites with non-uniformly or randomly staggered platelet distribution. *J. Mech. Phys. Solids*, 2010. **58**(10): p. 1646-1660.
14. Gao, E., et al., Strength loss of carbon nanotube fibers explained in a three-level hierarchical model. *Carbon*, 2018. **138**: p. 134-142.
15. Hill, F.A., et al., Enhancing the tensile properties of continuous millimeter-scale carbon nanotube fibers by densification. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2013. **5**(15): p. 7198-7207.

16. Liu, K., et al., Scratch-resistant, highly conductive, and high-strength carbon nanotube-based composite yarns. *ACS Nano*, 2010. **4**(10): p. 5827-5834.
17. Ryu, S., et al., High-strength carbon nanotube fibers fabricated by infiltration and curing of mussel-inspired catecholamine polymer. *Adv. Mater.*, 2011. **23**(17): p. 1971-1975.
18. Zhong, X.H., et al., Continuous multilayered carbon nanotube yarns. *Adv. Mater.*, 2010. **22**(6): p. 692-696.
19. Ci, L., et al., Multifunctional macroarchitectures of double-walled carbon nanotube fibers. *Adv. Mater.*, 2007. **19**(13): p. 1719-1721.
20. Zhang, X.B., et al., Spinning and processing continuous yarns from 4-inch wafer scale super-aligned carbon nanotube arrays. *Adv. Mater.*, 2006. **18**(12): p. 1505-1510.
21. Zhang, X.F., et al., Ultrastrong, stiff, and lightweight carbon-nanotube fibers. *Adv. Mater.*, 2007. **19**(23): p. 4198-4201.
22. Ghemes, A., et al., Fabrication and mechanical properties of carbon nanotube yarns spun from ultra-long multi-walled carbon nanotube arrays. *Carbon*, 2012. **50**(12): p. 4579-4587.
23. Miao, M., Electrical conductivity of pure carbon nanotube yarns. *Carbon*, 2011. **49**(12): p. 3755-3761.
24. Tran, C.D., et al., Improving the tensile strength of carbon nanotube spun yarns using a modified spinning process. *Carbon*, 2009. **47**(11): p. 2662-2670.
25. Zhang, Y.N., et al., Failure mechanisms of carbon nanotube fibers under different strain rates. *Carbon*, 2012. **50**(8): p. 2887-2893.
26. Zu, M., et al., The effective interfacial shear strength of carbon nanotube fibers in an epoxy matrix characterized by a microdroplet test. *Carbon*, 2012. **50**(3): p. 1271-1279.
27. Nakayama, Y., Synthesis, nanoprocessing, and yarn application of carbon nanotubes. *Jpn. J. Appl. Phys.*, 2008. **47**(10): p. 8149-8156.
28. Jayasinghe, C., et al., Spinning yarn from long carbon nanotube arrays. *J. Mater. Res.*, 2011. **26**(05): p. 645-651.
29. Zhang, S., et al., Solid-state spun fibers and yarns from 1-mm long carbon nanotube forests synthesized by water-assisted chemical vapor deposition. *J.*

Mater. Sci., 2008. **43**(13): p. 4356-4362.

30. Xu, W., et al., High-strength carbon nanotube film from improving alignment and densification. Nano Lett., 2016. **16**(2): p. 946-952.
31. Liu, K., et al., Fabrication and processing of high-strength densely packed carbon nanotube yarns without solution processes. Nanoscale, 2012. **4**(11): p. 3389-3393.
32. Xu, G., et al., Continuous electrodeposition for lightweight, highly conducting and strong carbon nanotube-copper composite fibers. Nanoscale, 2011. **3**(10): p. 4215-4219.
33. Liu, K., et al., Carbon nanotube yarns with high tensile strength made by a twisting and shrinking method. Nanotechnology, 2010. **21**(4): p. 045708.
34. Wang, J.N., et al., High-strength carbon nanotube fibre-like ribbon with high ductility and high electrical conductivity. Nat. Commun., 2014. **5**: p. 3848.
35. Zhong, X.H., et al., Effective reinforcement of electrical conductivity and strength of carbon nanotube fibers by silver-paste-liquid infiltration processing. Phys. Chem. Chem. Phys., 2013. **15**(11): p. 3861-3865.
36. Atkinson, K.R., et al., Multifunctional carbon nanotube yarns and transparent sheets: Fabrication, properties, and applications. Phys. B, 2007. **394**(2): p. 339-343.
37. Behabtu, N., et al., Strong, light, multifunctional fibers of carbon nanotubes with ultrahigh conductivity. Science, 2013. **339**(6116): p. 182-186.
38. Ericson, L.M., et al., Macroscopic, neat, single-walled carbon nanotube fibers. Science, 2004. **305**(5689): p. 1447-1450.
39. Koziol, K., et al., High-performance carbon nanotube fiber. Science, 2007. **318**(5858): p. 1892-1895.
40. Li, Y.L., et al., Direct spinning of carbon nanotube fibers from chemical vapor deposition synthesis. Science, 2004. **304**(5668): p. 276-278.
41. Zhang, M., et al., Multifunctional carbon nanotube yarns by downsizing an ancient technology. Science, 2004. **306**(5700): p. 1358-1361.
42. Zhu, H.W., et al., Direct synthesis of long single-walled carbon nanotube strands. Science, 2002. **296**(5569): p. 884-886.
43. Randeniya, L.K., et al., Composite yarns of multiwalled carbon nanotubes with metallic electrical conductivity. Small, 2010. **6**(16): p. 1806-1811.

44. Zhang, S., et al., Macroscopic fibers of well-aligned carbon nanotubes by wet spinning. *Small*, 2008. **4**(8): p. 1217-1222.
45. Zhang, X., et al., Strong carbon-nanotube fibers spun from long carbon-nanotube arrays. *Small*, 2007. **3**(2): p. 244-248.
46. Zheng, L., et al., Tuning array morphology for high-strength carbon-nanotube fibers. *Small*, 2010. **6**(1): p. 132-137.
47. Headrick, R.J., et al., Structure-property relations in carbon nanotube fibers by downscaling solution processing. *Adv. Mater.*, 2018. **30**: 1704482
48. Chae, H.G., et al., High strength and high modulus carbon fibers. *Carbon*, 2015. **93**: p. 81-87.
49. Newcomb, B.A., Processing, structure, and properties of carbon fibers. *Compos. Part A*, 2016. **91**: p. 262-282.
50. Xu, Z., et al., Ultrastiff and strong graphene fibers via full-scale synergetic defect engineering. *Adv. Mater.*, 2016. **28**(30): p. 6449-6456.
51. Di, J., et al., Strong, twist-stable carbon nanotube yarns and muscles by tension annealing at extreme temperatures. *Adv. Mater.*, 2016. **28**(31): p. 6598-6605.
52. Zhang, M., et al., Multifunctional pristine chemically modified graphene films as strong as stainless steel. *Adv. Mater.*, 2015. **27**(42): p. 6708-6713.
53. Xin, G., et al., Highly thermally conductive and mechanically strong graphene fibers. *Science*, 2015. **349**(6252): p. 1083-1087.
54. Cheng, Q., et al., Bioinspired layered materials with superior mechanical performance. *Acc. Chem. Res.*, 2014. **47**(4): p. 1256-1266.
55. Xu, Z., et al., Ultrastrong fibers assembled from giant graphene oxide sheets. *Adv. Mater.*, 2013. **25**(2): p. 188-193.
56. Lin, X., et al., Fabrication of highly-aligned, conductive, and strong graphene papers using ultralarge graphene oxide sheets. *ACS Nano*, 2012. **6**(12): p. 10708-10719.
57. He, F., Carbon fiber and graphite fiber. 2010: Chemical Industry Press.
58. Dai, Z.H., et al., Hierarchical graphene-based films with dynamic self-stiffening for biomimetic artificial muscle. *Adv. Funct. Mater.*, 2016. **26**(38): p. 7003-7010.

2、研究内容及实现方案。请写明研究思路和框架，主要研究方法（3000 字以内）。

2.1 研究内容与科学问题

申请人拟结合材料多级微观结构表征与宏观力学行为测试，以分子模拟、介观粗粒化与多尺度连续介质力学理论为主，对低维碳基宏观材料的微结构与本构模型定量关联研究。拟通过引入能够表征多级微结构特征的内变量，描述经过统计平均处理的微观量与细观特征的分布与演化规律，建立微结构关联的本构理论，为力学性能优异的低维碳基宏观材料的微结构设计提供理论基础。主要研究内容如下：

(1) 系统研究低维碳基宏观材料微观结构对其宏观力学行为的影响

与金属、陶瓷、高分子等传统材料不同，低维碳基宏观组装纤维、薄膜是由大比表面积分子以非共价界面自下而上构筑而成，具有丰富的多级结构（图 1b-c）。低维碳结构在生长或制备过程中，界面间较强的范德华作用力使低维碳结构聚集成微片/微束结构，微片/微束中的低维碳结构单元排布比较规律，但微片/微束交缠在一起形成更高级的褶皱/卷曲结构，因而低维碳基宏观材料呈现出多级结构的特征，即第一级构筑单元（石墨烯和 CNT），第二级石墨烯微片/CNT 微束结构，第三级褶皱/卷曲结构。这方面亟待解决的科学问题包括 **(1) 每一层级的结构对宏观本构关系的贡献如何体现？(2) 如何根据这些多级结构信息预测低维碳基宏观材料的力学行为？** 低维碳基宏观材料的多级结构表征通常需要借助于光学显微镜、电子显微镜、X 射线、拉曼等技术。目前实验报道的低维碳基宏观材料多级微结构的物理图像往往是局部的、非均匀的（图 1b-c），缺乏具有统计意义的细观元素及其信息。因此需要结合原位电镜和 X 射线等技术，表征局部微结构特征与大范围统计信息，构建参数化微结构的多尺度计算模型与高通量计算方法，揭示每一层级微结构对宏观力学行为的影响。

(2) 建立低维碳基宏观材料多级微结构关联的本构模型

从材料变形的微观机制出发来研究本构关系不仅可以更深入地认识材料变形和运动的本质，也可以避免在本构关系中盲目地引入一些非必要的材料参数。

对于低维碳基宏观材料，不同层级的微结构对于宏观组装材料的本构关系有着不同的影响。由于问题的复杂性，直接从原子分子出发来建立相应的宏观本构关系存在困难，因此需要利用细观力学方法和多级次数学模型刻画不同层级的微结构，建立基于自下而上多级微结构的力学模型来刻画宏观本构关系。这方面亟待解决的问题是 **(1) 如何利用细观力学均匀化方法描述微结构的非均匀性、多级特性？(2) 如何平衡连续介质力学描述的简洁、普适性与多级微结构的复杂性，从而建立适合应用于实际材料设计的本构模型？** 这需要借助于实验和多尺度计算，提取密度、取向度、构筑单元尺寸、界面接触几何等关键微结构参数为内变量，基于细观力学均匀化方法和多尺度连续介质力学理论建立多级次力学模型，并耦合为多级微结构关联的本构模型。

(3) 利用多级微结构关联的本构模型进行材料设计

将低维碳基宏观材料的多级微结构以内变量的形式引入本构模型，可以建立多级微结构关联的本构模型。这方面面临的科学问题主要是 **(1) 如何评价微结构关联的本构模型的普适性？(2) 如何利用微结构关联的本构模型进行材料微结构设计？** 这需要借助于多尺度计算模拟与实验，验证本构模型的微观结构参数、宏观力学行为描述，从而检验模型的鲁棒性。结合本构模型与多尺度计算、实验对比，对本构模型中表征微结构特征信息的内变量进行迭代优化，将优化后的本构模型用于优异力学性能材料的发掘与设计。

2.2 研究方案

根据上述研究内容，初步拟定研究方案如图 2 所示，分为 3 个部分：

(1) 低维碳基宏观材料的微结构实验表征与宏观本构关系测试

低维碳基宏观材料的多级结构表征通常需要借助于光学显微镜、电子显微镜、X 射线、拉曼等技术。申请人拟从清华大学化学系李春教授、中科院苏州纳米所吕卫帮研究员，德克萨斯大学达拉斯纳米技术研究所 Ray Baughman 院士等合作研究组获得结构与性能稳定的石墨烯组装膜和 CNT 纤维样品。通过切片等制备试样，经透射电子显微镜表征管束、片层结构；通过 X 射线衍射与原位拉曼等表征构筑单元的褶皱、卷曲、取向度；通过微型拉伸试验机获取样品的宏观本构实验曲线。

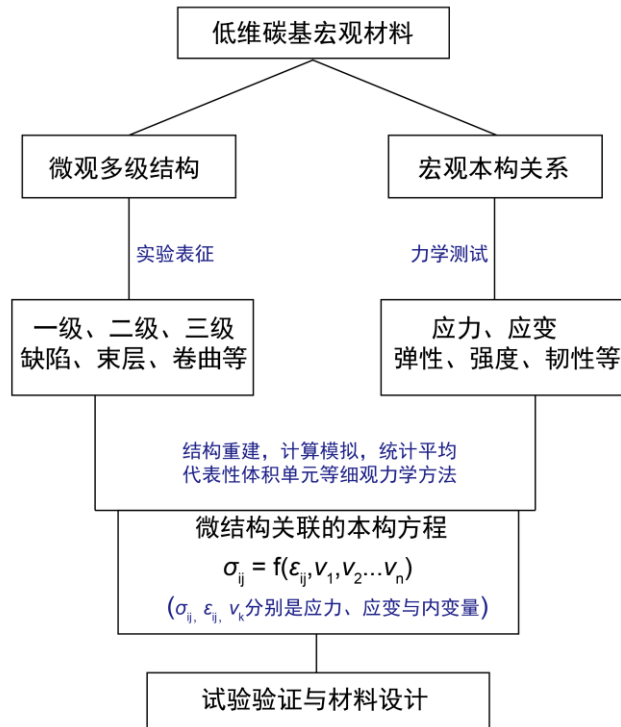


图 2 研究方案

(2) 微结构重建、计算模拟与均匀化方法

对于实验表征的多级微结构直接通过原位方法测试其复杂多级的力学行为存在一定的技术困难。因此需要结合实验表征的构筑单元尺寸、密度、取向度等微结构空间分布与统计信息，提取特征参数，并使用概率统计理论重构真实结构的计算模型，使用分子模拟、介观粗粒化方法研究多级微结构的力学特性，选取代表性体积单元描述非均匀微结构的细观特性，基于细观力学均匀化方法和多尺度连续介质力学理论建立自下而上的多级次数学模型，并耦合为微结构关联的本构模型。

(3) 微结构关联本构模型的普适性及材料设计

微结构关联本构模型的普适性是用于材料设计的必要条件。申请人拟从清华大学化学系李春教授和德克萨斯大学达拉斯纳米技术研究所 Ray Baughman 院士等合作研究组开展此项工作。首先，为了测试本构模型的普适性，需要利用不同工艺制备低维碳基宏观材料用于力学测试与微结构表征，提取微结构参数代入本构模型，检验本构模型和试验本构关系的一致性，然后对本构模型参数进行迭代优化，进而用于优异力学性能材料的发掘与设计。

2.3 可行性分析

(1) 理论与多尺度计算

在理论与多尺度计算方面，申请人基于石墨烯组装膜与 CNT 纤维实验表征的微结构进行计算模型构建，使用第一性原理计算、经验势分子模拟、介观粗粒化方法获取了微结构代表性体积单元的力学特性，基于参数化代表性体积单元模型开展了理论与计算分析，发现了石墨烯组装膜层间的最优交联密度，揭示了 CNT 纤维的抗拉强度的多尺度衰减规律 (*Gao E. et al. ACS Appl. Mater. Inter.* 9, 24830–24839, 2017; *Gao E. et al. Carbon* 138, 134-142, 2018)。基于前期工作，申请人对于低维碳基宏观材料的多级微结构与宏观力学行为的本构理论构建已经形成了较为完整的研究思路。

(2) 材料制备与实验表征

在石墨烯组装膜制备方面，申请人曾在清华大学化学系李春教授研究组合作研究 1 年，在石墨烯组装膜研究方面有着良好的合作 (*Gao E. et al. Carbon* 118, 467-474, 2017)。李春教授组制备的石墨烯组装膜结构与性能稳定，适用于本项目的研究。在 CNT 纤维制备方面，申请人 2016 年 9 月-2017 年 3 月曾前往美国德克萨斯大学达拉斯纳米技术研究所 Ray Baughman 研究组访问研究半年，在 CNT 纤维制备与机理研究方面保持着合作 (*Science* 357, 773-778, 2017)。Ray Baughman 院士研究组是世界上首先将 CNT 拧成纱线的研究组之一，在 CNT 纤维制备方面具有丰富的经验。申请人目前相关课题研究所需的 CNT 及其纤维由 Ray Baughman 研究组提供。

在实验表征方面，申请人在德克萨斯大学纳米技术研究所系统研究了 CNT 纤维的多级微结构特征与力电耦合的机制，对于低维碳材料微结构的先进实验表征比较熟悉，并具备高通量编程后处理实验结果的经验，可以对微结构进行高通量表征。此外，申请人所在的力学实验中心具备包括扫描电子显微镜，纳米压痕仪在内的多种材料微结构表征设备。部分实验表征也可以通过校内外共享实验平台实施，例如利用申请人攻读博士学位期间所参与搭建的原位拉曼石墨烯组装膜片层取向表征系统（北京，清华大学）。对于宏观本构关系的测试，申请人所在的复杂介质多尺度力学中心具备不同量程的拉力试验机，申请人在这个方面也具

有一定经验，曾提出测量低维碳基宏观材料本征力学性能的方法 (*Gao E. et al. Carbon 118, 467-474, 2017*)，有效避免了小尺寸薄膜测试中的夹距效应和膜应变。

3、第一、第二年研究工作进度，总体预期成果目标（1000字以内）。

3.1 研究工作进度

(1) 2019 年 1 月-2019 年 6 月

调研文献，进一步追踪研究进展。分别与清华大学化学系李春教授，德克萨斯大学纳米技术研究所 Ray Baughman 院士实验研究组开展石墨烯组装膜和 CNT 纤维的材料制备、表征等方面的合作。建立微结构的高通量表征方法，细化微结构计算模型重建的理论方法。

(2) 2019 年 7 月-2019 年 12 月

对不同微结构材料进行本构关系测试。对复杂多级微结构高通量表征获取微结构信息的统计分布，并提取关键参数重建计算模型，利用第一性原理、经验势分子模拟与介观粗粒化方法研究微结构的力学特性。系统研究不同层级微结构的力学行为以及其与宏观本构关系的关联。

(3) 2020 年 1 月-2020 年 6 月

结合实验表征的构筑单元尺寸、密度、取向度等微结构空间分布与统计信息，提取特征参数，并使用概率统计理论重构真实结构的计算模型，使用代表性体积单元等细观力学均匀化理论描述非均匀微结构的细观特性，将包含细观信息的内变量引入本构方程，建立微结构关联的本构模型。

(4) 2020 年 7 月-2020 年 12 月

与实验研究组合作，利用不同工艺制备低维碳基宏观材料用于力学测试与微结构表征，提取微结构参数代入本构模型，检验理论本构模型和试验本构关系的一致性，然后对本构模型参数进行迭代优化，进而用于优异力学性能材料的发掘与设计。

3.2 总体预期成果目标

本研究拟在低维碳基宏观材料微观结构与宏观力学行为之间建立定量本构模型，为材料的优异力学性能设计提供理论基础。预期成果目标：

- 1，在力学及相关学科发表高水平 SCI 学术论文 3 篇，其中 JMPS 等固体力学重要期刊论文 1 篇；
- 2，申请微结构高通量表征相关的发明专利 1 项；
- 3，申请其他省部级和国家项目 1-2 项持续开展后续应用研究，进而在有广泛应用前景的材料力学性能设计方面取得突破性进展。

4、工作基础和条件。该项目的前期工作基础及现有的科研环境、仪器设备等（500 字以内），依托单位对该项目前期支持情况（单位内部科研项目、经费及相关政策支持等，500 字以内），依托重点实验室简介（500 字以内）。

4.1 前期基础

申请人主要从事微纳米结构及其宏观组装材料的力学理论、计算与实验研究，前期的工作基础可以分为以下 2 个部分：

(1) 低维结构的基本力学特性研究

申请人使用介观粗粒化方法和断裂力学理论系统研究了二维结构机械剥离的力学行为，给出了用于判断二维结构剥离的难易程度以及剥离形貌的控制方程，对实验剥离二维材料具有指导意义（图 3a-b）。相关工作发表于固体力学标志性期刊 JMPS (*Gao E et al. J. Mech. Phys. Solids*, 115, 248-262, 2018)。此外，申请人基于薄壳理论及第一性原理计算定义了多种二维结构的厚度 (*Gao E. et al. J. Appl. Mech.* 82, 121012, 2015)，使二维材料在连续介质力学框架下进行描述，解决了厚度定义的争议（图 3c-d）。

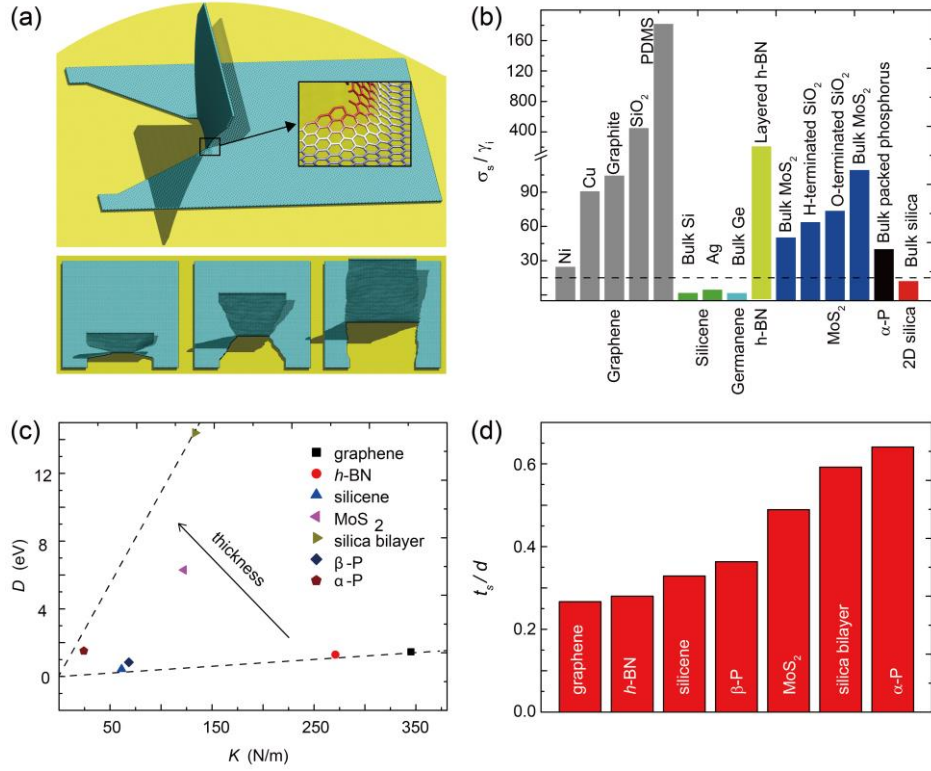


图 3 (a) 二维材料机械剥离的粗粒化模拟。(b) 机械剥离的难易被定义为二维结构面内抗拉强度 σ_s 与界面结合能 γ_i 之比 (Gao E et al. *J. Mech. Phys. Solids*, 115, 248-262, 2018)。(c) 二维结构弯曲刚度 D 和面内拉伸刚度 K 的第一性原理计算。(d) 薄壳厚度 t_s 与层间距 d 之比 (Gao E. et al. *J. Appl. Mech.* 82, 121012, 2015)。

(2) 低维结构组装力学行为研究

在低维结构组装力学行为研究方面，申请人建立了 CNT 纤维抗拉强度的多尺度力学模型 (Gao E. et al. *Carbon* 138, 134-142, 2018)。理论分析结果揭示了造成 CNT 纤维拉伸强度下降的关键因素：碳纳米结构缺陷、界面间不充分载荷传递、微结构的低密度与波动特征 (图 4)。此外，申请人基于真实微结构的实验表征进行计算模型构建，系统研究了多种层间交联对石墨烯组装膜力学性能的影响 (图 5) (Gao E. et al. *ACS Appl. Mater. Inter.* 9, 24830–24839, 2017)。在力学性能测试方面，申请人提出了测量低维碳基宏观材料本征力学性能的方法 (Gao E. et al. *Carbon* 118, 467-474, 2017)，有效避免了小尺寸薄膜测试中的预应变问题 (图 6)。

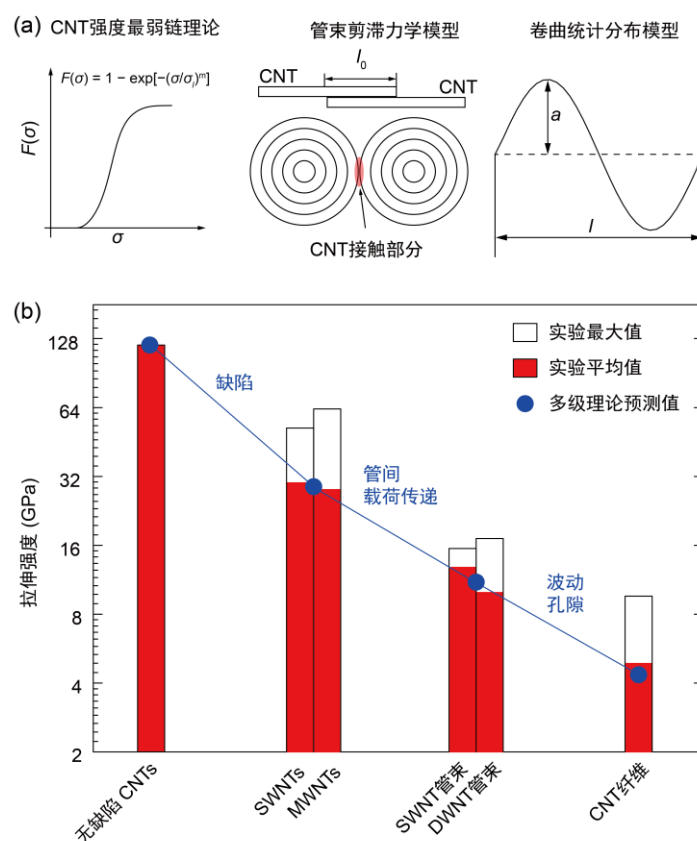


图 4 (a) CNT 纤维强度的三级理论模型。(b) 抗拉强度从理想 CNT，有缺陷 CNT，CNT 管束到 CNT 纤维的演变 (*Gao E. et al. Carbon 138, 134-142, 2018*)。

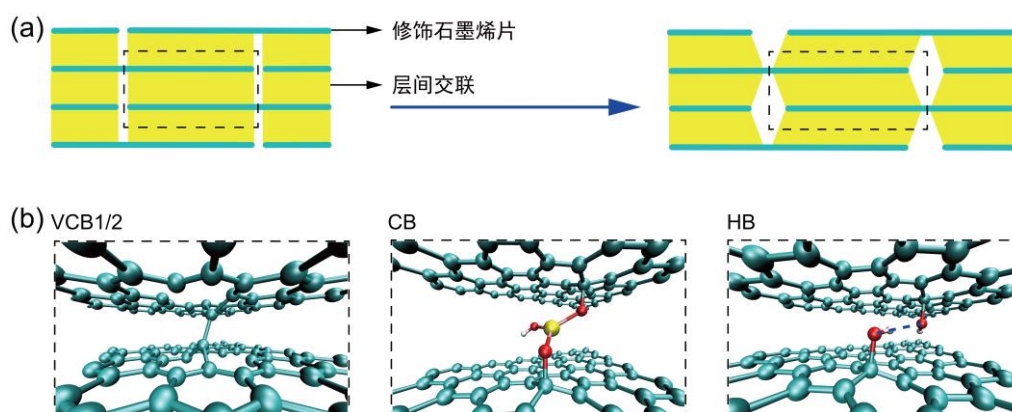


图 5 (a) 变形前后的剪滞模型，虚线所示为该模型的代表性体积单元。(b) 层间交联的第一性原理计算模型，分别选取了共价键交联，配位键交联，氢键交联 (*Gao E. et al. ACS Appl. Mater. Inter. 9, 24830–24839, 2017*)。

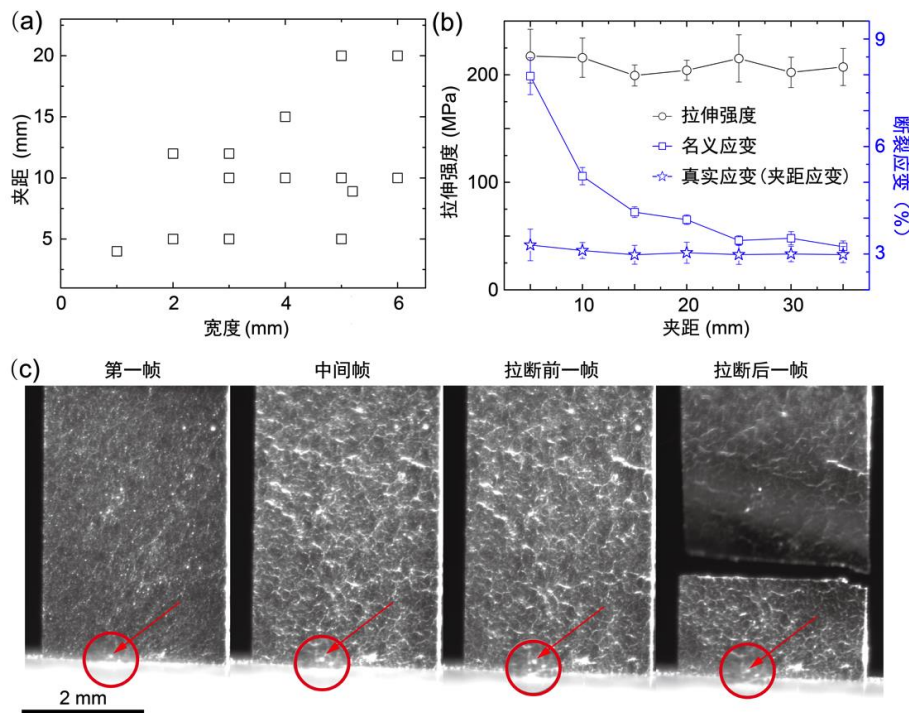


图 6 (a) 文献中石墨烯组装膜拉伸测试采用的样品夹距与宽度。(b) 样品夹距对拉伸强度、名义应变以及夹距应变的影响。(c) 拉伸测试过程中相机记录的图像显示，样品端部存在剪切滑移现象 (*Gao E. et al. Carbon 118, 467-474, 2017*)。

4.2 支持条件

该课题将依托湖北省力学实验教学示范中心、武汉大学土建学院复杂介质多尺度力学中心，研究工作具有基础性、应用性与学科交叉性的显著特征。申请人所在的武汉大学土木建筑工程学院力学学科为一级学科，湖北省重点学科，具有博士学位授予权。学院实验室总面积 8000 余平方米，拥有以微纳米力学测试系统为代表的国际最先进力学与材料试验设备等仪器设备。学院具有优良的微纳米力学、多尺度力学研究条件与团队合作氛围，包括“千人计划”孙庆平教授主持的复杂介质多尺度力学实验中心、“青年千人”刘泽教授先进微制造力学、张作启教授微纳米结构与生物力学等研究团队。

申请人 2018 年加入武汉大学工程力学系，目前主持引进人才科研启动项目一项。在多尺度计算方面，已经购置 48 核服务器一台，此外工程力学系 2018 年搭建完成了 480 核曙光服务器 1 台，现已投入运营。在实验制备方面，申请人已搭建了 CNT 加捻制备纤维装置和石墨烯组装膜制样设备，使用实验合作研究

组提供的 CNT 阵列和石墨烯溶液等原料,可以制备出 CNT 纤维和石墨烯组装膜样品用于微结构表征和力学测试。

5、申请人个人简要情况介绍、已取得的主要学术成绩、创新点及其科学意义（必要时可列出标志性论文、获奖证书等相关材料，不超过 3 项，2000 字以内）。

自 2014 年至今,申请人在发展低维碳基宏观材料多尺度力学理论、发掘低维结构力学新机制等方面进行了应用基础研究,相关成果发表 SCI 论文数 22 篇,授权中国发明专利 2 项。其中第 1 作者论文 8 篇 (含共同通讯作者论文 1 篇),第 2 作者论文 8 篇,包括固体力学标志性期刊 *J. Mech. Phys. Solids* (第 1 作者)、*J. Appl. Mech.* (第 1 作者)、*Carbon* (第 1 作者 2 篇,第 2 作者 1 篇)、*Nanoscale* (第 1 作者)、*ACS Appl. Mater. Inter.* (第 1 作者)、*Chem. Mater.* (共同第 1 作者)、*Nat. Commun.* (第 3、第 4 作者各一篇)、*Science* (第 25 作者) 等。目前论文 SCI 他引为 225 次,相关工作受到了国际同行的认可和关注,代表性创新成果及科学意义:

- 1, 申请人利用第一性原理计算了双层二氧化硅薄膜的弯曲刚度,预报了其为宽带隙且易于实验转移的二维材料 (*Gao E. et al. J. Appl. Phys.* 119, 014301, 2016), 为实验的相关制备和表征提供了理论基础。**德国科学院院士 Hans-Joachim Freund 等人以申请人工作为理论依据,实验实现了大面积二氧化硅薄膜转移,并在多篇文章多次正面引用申请人的工作 (*ACS Nano*, 10, 7982, 2016; *Chem. Mater.*, 29, 931-934, 2017; *J. Am. Chem. Soc.*, 138, 8985-8996, 2016);**此外, Hans-Joachim Freund 院士研究组使用氦原子散射方法测出了双层二氧化硅的弯曲刚度,相关成果发表于物理学标志性期刊 (*Phys. Rev. Lett.*, 120, 226101, 2018), **并在论文摘要中说明弯曲刚度测量值与申请人的理论计算一致 (We find a value of $\kappa = 8.8$ eV which is of the same order of magnitude as theoretical values in the literature for freestanding crystalline 2D silica);**
- 2, 申请人 (第 1 作者) 利用薄壳理论及第一性原理计算定义了多种二维结构的厚度 (*Gao E. et al. J. Appl. Mech.* 82, 121012, 2015), **使二维结构可以在连续**

- 介质力学的框架下进行描述，解决了二维材料厚度定义的争议。该工作被美国科学院院士高华健等人正面引用 (*Extreme Mech. Lett.* 13, 42, 2017)。申请人使用第一性原理、介观粗粒化方法和断裂力学理论系统研究了二维结构的机械剥离机制，给出了二维结构机械剥离几何形状的控制方程，可以用于判断二维结构的剥离难易程度以及剥离形貌，相关工作近期发表于固体力学标志性期刊 (*Gao E et al. J. Mech. Phys. Solids*, 115, 248-262, 2018)；
- 3, 申请人建立了 CNT 纤维抗拉强度的多尺度力学模型 (*Gao E. et al. Carbon* 138, 134-142, 2018)。理论分析结果揭示了造成 CNT 纤维拉伸强度下降的关键因素：碳结构缺陷、界面间不充分载荷传递、微结构的低密度与波动特征。此外，申请人基于真实微结构的实验表征进行计算模型构建，使用第一性原理计算获取微结构代表性体积单元的力学特性 (*Gao E. et al. ACS Appl. Mater. Inter.* 9, 24830 - 24839, 2017)，系统研究了多种层间交联对石墨烯组装膜力学性能的影响，发现石墨烯组装膜层间交联密度存在最优值。在力学性能测试方面，申请人提出了测量低维碳基宏观材料本征力学性能的方法 (*Gao E. et al. Carbon* 118, 467-474, 2017)，有效避免了小尺寸薄膜测试中的质应变问题；
- 4, 申请人与美国工程院院士 Ray Baughman 教授的合作研究成果发表于 *Science* 357, 773-778, 2017, 被新华社、科技日报等媒体广泛报道。申请人的贡献是建立了 CNT 纤维轴向拉伸与径向压力的定量关系，揭示了 CNT 纤维力电转换的理论机制，被 Ray Baughman 院士评价为“极为重要的贡献(critically important contributions, wonderfully enlightening contributions)”。

附：3 篇代表性工作

- [1] Gao E et al. Mechanical exfoliation of two-dimensional materials, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 115, 248-262, 2018
- [2] Gao E et al. Strength loss of carbon nanotube fibers explained in a three-level hierarchical model, *Carbon*, 138, 134-142, 2018
- [3] Gao E et al. Intrinsic mechanical properties of graphene oxide films: Strain characterization and the gripping effects, *Carbon*, 118, 467-474, 2017