

螺旋碳纳米管纤维表面动摩擦行为研究*

张新禄¹, 王鹏飞^{*1}, 汪国睿¹, 陈心安¹, 徐松林¹

(1. 中国科学技术大学中国科学院材料力学行为和设计重点实验室, 安徽 合肥 230027)

摘要: 碳纳米管纤维因具有优异的力学和电学性能, 在微纳器件、柔性电子和高性能复合材料中具有重要应用前景。然而, 螺旋结构对碳纳米管纤维表面动摩擦行为的影响规律仍不明确。本文通过可控纺丝法制备了表面角在 $10^\circ \sim 45^\circ$ 范围内的螺旋碳纳米管纤维, 并采用原子力显微镜 (AFM) 实验和分子动力学模拟方法研究其不同法向载荷下的表面摩擦力分布规律。结果表明, 纤维表面摩擦力随法向载荷增加而升高, 并表现出明显的方向依赖性; 随着表面角的增加, 平均摩擦力呈现先升高、后降低、再回升的非单调变化趋势, 其中 20° 样品具有较高的平均摩擦力。表面形貌分析表明, 表面角影响纤维表面局部结构, 是影响摩擦力变化的重要因素。分子动力学模拟结果进一步表明, 20° 样品较高的摩擦响应与较稳定的界面接触和增强的局部结构响应有关。加捻诱导的表面形貌重构和局部接触状态变化共同影响碳纳米管纤维的动摩擦行为, 可为冲击防护复合材料中碳纳米管纤维间滑移耗能、界面摩擦调控及耐磨结构设计提供微观依据。

关键词: 碳纳米管纤维; 加捻; 表面角; AFM; 动摩擦; 分子动力学模拟

中图分类号: O347; O521.9

文献标识码: A

在高速冲击和侵彻载荷作用下, 纤维增强复合材料的抗弹性能与纤维本身的强度、模量以及纤维束间的滑移、摩擦等能量耗散过程密切相关。已有研究表明, 纤维复合材料在弹道冲击过程中会产生剪切断裂、基体破裂分层、纤维拉伸断裂等多种失效模式, 界面结合状态和层间滑移行为会显著影响材料的弹道极限和吸能效率^[1-5]。同时, 纤维缠绕界面的动摩擦和黏滑行为会改变界面载荷传递与滑移稳定性, 从而影响纤维结构在复杂载荷下的安全性和稳定性^[6]。因此, 从微观尺度理解纤维表面的动摩擦行为, 对揭示纤维增强复合材料在冲击载荷下的界面滑移耗能机制和优化抗冲击防护结构具有重要意义。

碳纳米管纤维因具有高强度、高模量、低密度和良好的柔韧性, 在轻质高强纤维材料、柔性结构和抗冲击复合材料中具有重要应用潜力^[7-13]。与传统纤维相比, 碳纳米管纤维内部和表面的管束取向、孔隙结构及界面接触状态会显著影响载荷传递、滑移摩擦和能量耗散行为, 特别是在冲击或动态载荷作用下, 纤维束间的相对滑移和界面摩擦可作为重要的耗能途径。因此, 研究碳纳米管纤维表面的微观摩擦行为, 不仅有助于理解其纳米尺度的接触机制, 还能为纤维增强防护材料的界面设计提供依据。

近年来, 碳纳米管纤维的摩擦学行为受到广泛关注, 相关研究涵盖单根碳纳米管、碳纳米管束、取向阵列和纤维增强复合材料等不同尺度体系^[14-17]。目前, 碳纳米管摩擦行为研究主要集中于基

*收稿日期: 2026.06.13; 修回日期: 2026.07.10

基金项目: 国家自然科学基金 (12372372, 11872361)

作者简介: 张新禄 (2002—), 女, 硕士研究生, 主要从事碳纳米管摩擦行为研究。

E-mail: xlzhangxl@mail.ustc.edu.cn

通信作者: 王鹏飞 (1985—), 男, 博士, 副研究员, 主要从事材料动态力学行为研究. E-mail:

pfwang5@ustc.edu.cn

底支撑的单根碳纳米管及垂直取向碳纳米管阵列。前者多采用 AFM 横向力模式研究探针沿管轴方向和横向滑移时的摩擦各向异性及管体变形效应^[17,18]；后者主要关注垂直阵列碳纳米管薄膜在不同载荷、扫描速度、针尖尺寸和湿度条件下的黏附与摩擦响应^[19-21]，或通过宏观纤维束拉伸测试，获得工程摩擦系数^[22]。Lucas 等^[17]通过 AFM 发现，探针在单根碳纳米管（Carbon nanotube, CNT）上进行横向滑动时的摩擦力显著高于纵向滑动的摩擦力，并将其归因于横向滑动诱发的“受阻滚动”效应。Chiu 等^[18]进一步发现，CNT 的结构缺陷会降低这种摩擦各向异性。然而，对于具有螺旋结构的碳纳米管纤维而言，其表面形貌、管束取向和局部接触状态更加复杂，现有单根碳纳米管（CNT）或 CNT 阵列的摩擦规律难以直接解释其界面滑移行为。同时，螺旋碳纳米管纤维表面角的改变会进一步影响探针与纤维表面间的接触面积和剪切阻力，因此需要进一步对其表面的动摩擦行为开展研究。

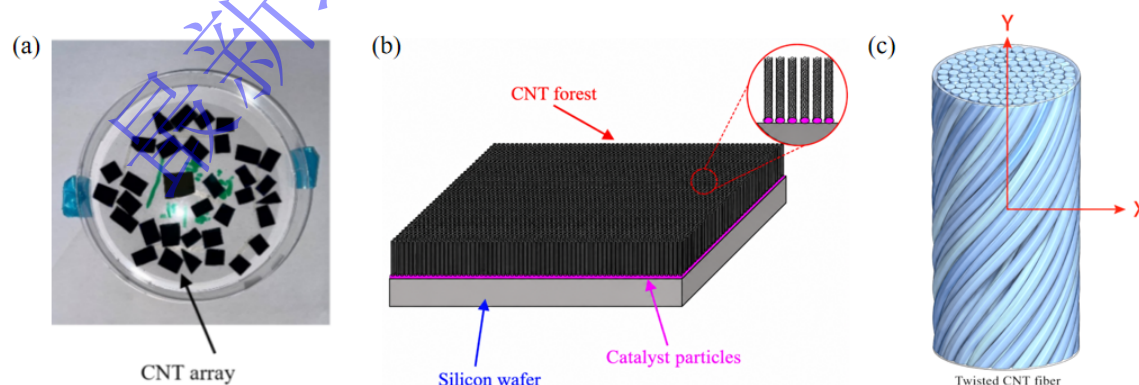
纤维加捻影响纤维的结构稳定性和力学性能，研究表明螺旋纤维的最佳性能通常出现在一个最优表面角附近^[23]。Anike 等^[24]发现碳纳米管纱线的韧性随捻角增加而提高，其强度则在约 30° 时达到峰值。然而，目前研究多集中于加捻对纤维轴向拉伸强度、韧性与导电性的影响^[23,24]，对横向加载下摩擦学行为的调控机制尚不明确。研究表面角对纤维表面微观摩擦规律的影响，对于纤维基复合材料界面耗能机制分析和结构设计至关重要^[25]。

基于此，本文制备了不同表面角的螺旋碳纳米管纤维，并使用 AFM 在不同法向载荷下研究其表面动摩擦行为。通过区域扫描、局域滑移摩擦测试以及表面形貌高度剖面的对比分析，揭示了表面角对碳纳米管纤维摩擦力和等效摩擦系数的非单调调控规律。在此基础上，进一步结合分子动力学模拟，从探针-纤维界面接触状态、局部结构刚度和管束重排行为角度分析了摩擦力变化的微观机制。研究结果可为碳纳米管纤维增强抗冲击复合材料中的纤维间滑移、界面摩擦调控和能量耗散机制分析提供基础依据。

1 实验与模拟方法

1.1 螺旋结构碳纳米管纤维

本研究基于化学气相沉积（CVD）法制备得到碳纳米管阵列，再经阵列纺丝获得加捻的碳纳米管纤维。CNT 阵列实物图如图 1(a)所示，其垂直取向的管束结构如图 1(b)所示。在 CVD 生长前，采用溅射技术在硅片基底表面沉积一层铁纳米颗粒作为催化剂，将负载催化剂的硅片置于 CVD 反应器中，并通入氢气（还原剂）、氩气（保护气）以及乙烯（碳源）。通过调控反应温度、气体流量配比及流速等工艺参数，得到垂直阵列化的碳纳米管阵列。



(a) Physical image of carbon nanotube array (b) Carbon nanotube forest structure (c) Geometric diagram

图 1 碳纳米管阵列及螺旋碳纳米管纤维结构示意图

Fig.1 Carbon nanotube array and structural schematic of spiral carbon nanotube fiber

碳纳米管纤维的纺丝制备使用图 2 所示的专用纺丝装置。纺丝初始阶段, 将生长好的碳纳米管阵列固定于支座上, 通过牵引阵列中的碳纳米管, 形成长度约为 20 cm 的宏观带状碳纳米管管束。将该带状管束的自由端固定于加捻电机的输出轴平台上, 电机以 440 rpm 的恒定转速对管束施加扭矩进行加捻, 最终形成具有螺旋结构的碳纳米管纤维, 如图 1(c)所示。此过程通过控制加捻的持续时间, 可调控纤维表面角。管束的宽度、初始牵伸长度以及加捻时间共同影响了纤维最终的表面角。本文将纤维表层管束取向与纤维轴向之间的夹角定义为表面角, 用于表征螺旋碳纳米管纤维的加捻程度。

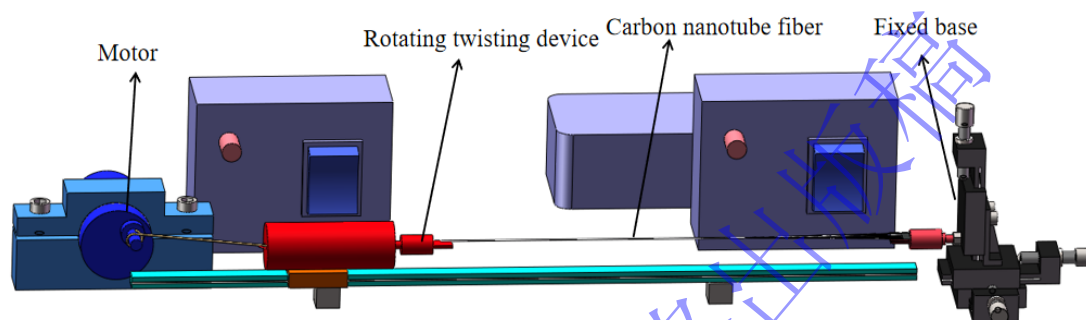
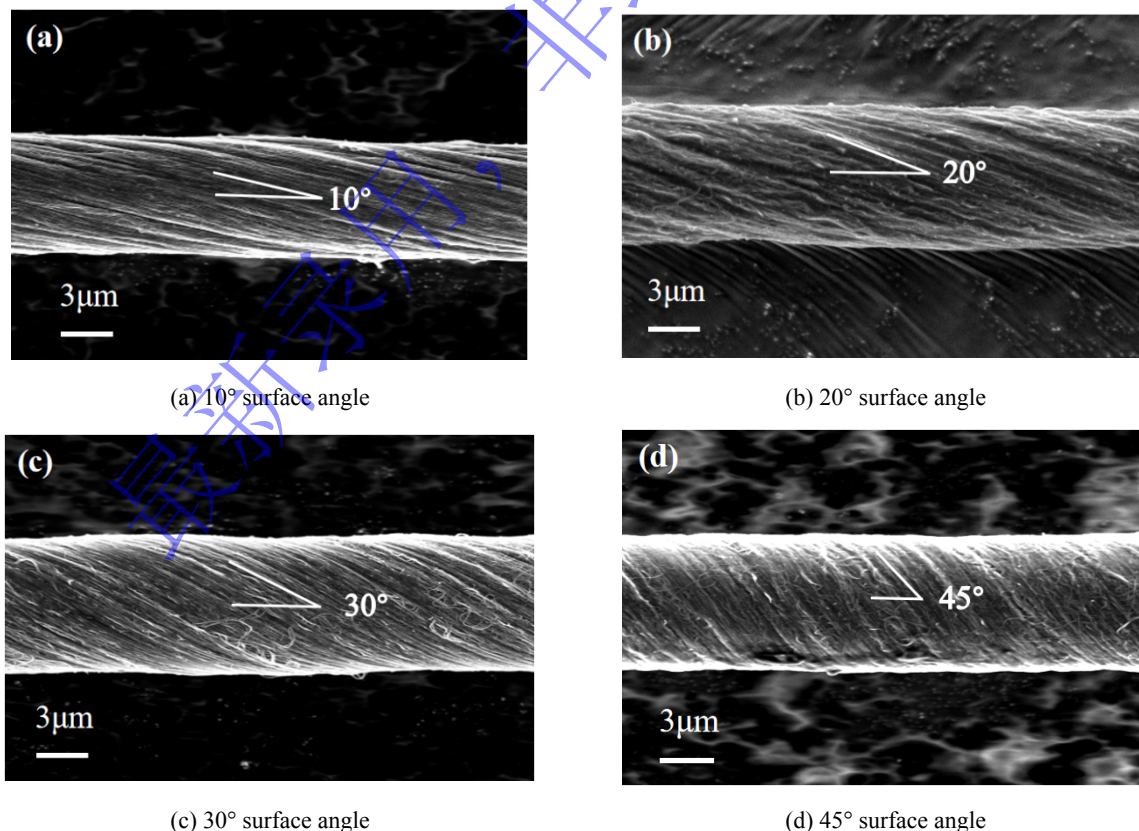


图 2 碳纳米管纤维纺丝装置示意图

Fig.2 Schematic diagram of carbon nanotube fiber spinning device



(a) 10° surface angle

(b) 20° surface angle

(c) 30° surface angle

(d) 45° surface angle

图 3 不同表面角碳纳米管纤维的微观结构

Fig.3 Microstructures of carbon nanotube fibers with different surface angles

为提高表面角统计结果的可靠性，每种目标表面角选取 3 根独立制备的碳纳米管纤维进行表征，并对每根纤维沿其轴向选取三个不同位置，在每个位置对 SEM 图像中表层管束取向与纤维轴向之间的夹角进行测量。取其算术平均值作为该纤维的表面角，结果表明，各组样品的实际表面角与目标角度接近，每种表面角的误差不超过 2°，说明本文采用的加捻制备方法具有较好的重复性。基于上述工艺制备的不同表面角的碳纳米管纤维，其微观表面形貌如图 3 所示。

1.2 微观动摩擦实验方法

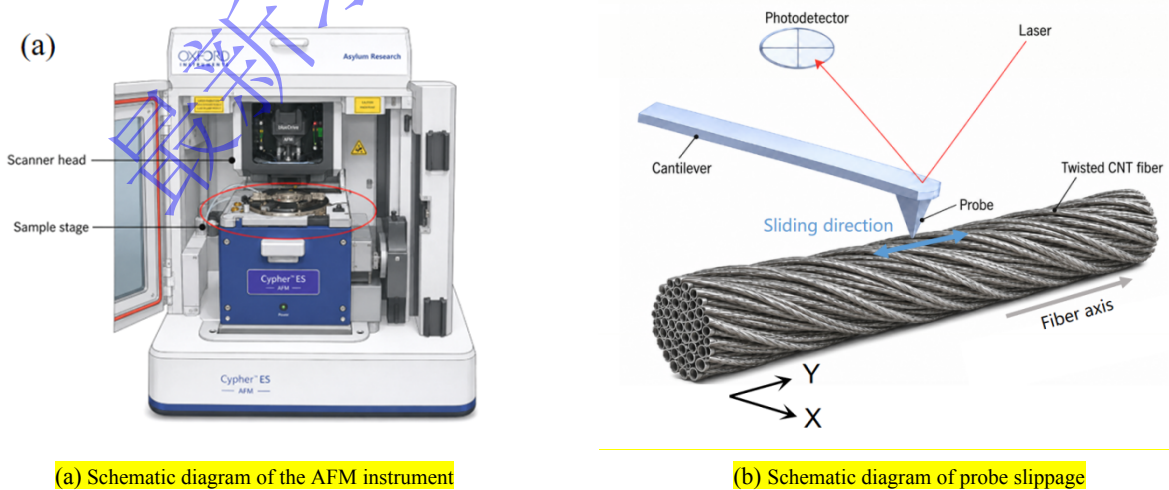
碳纳米管纤维表面 AFM 实验在室温环境下进行。测试采用英国牛津仪器 Asylum Research AFM 系统，选取 AC240 型矩形单晶硅悬臂梁探针（针尖半径约为 10 nm），在横向力模式下同步获取样品表面形貌和摩擦力分布。在每次 AFM 实验前，需对法向力以及横向力进行标定，具体标定在 Asylum Research 控制与分析软件中进行操作。横向力标定需进一步考虑悬臂梁扭转响应，本文首先根据悬臂梁几何尺寸、共振频率和品质因数，进行横向力校准；随后结合悬臂梁扭转刚度、探针有效高度将横向偏转电压信号转换为横向力信号。标定过程中使用的主要参数包括：探针厚度 $t=2\text{ }\mu\text{m}$ 、探针有效高度 $h=15\text{ }\mu\text{m}$ 、法向弹性常数 $K_x=217.19\text{ nN/nm}$ 、横向力校准系数 $\alpha=7040\text{ nN/V}$ 。通过该方法得到的 α 用于公式(1)中横向电压信号到摩擦力的转换。

形貌和摩擦力测绘区域为 $4\text{ }\mu\text{m}\times 4\text{ }\mu\text{m}$ ，扫描频率为 2.44 Hz，对应探针线速度为 $19.52\text{ }\mu\text{m/s}$ 。AFM 摩擦测试装置及探针在加捻碳纳米管纤维表面的滑移模型如图 4 所示。在 AFM 横向力模式测试中，为保证横向摩擦信号主要来源于悬臂梁的扭转响应，扫描方向设置为垂直于悬臂梁长轴方向。对于不同测试方向的比较，通过调节样品在载物台上的放置方向，使扫描方向相对于纤维轴向分别近似垂直和近似平行，从而获得 X 方向和 Y 方向的摩擦响应。

为减小基底倾斜、压电扫描器蠕变及环境漂移等因素对摩擦力测量的影响，实验采用双向扫描数据提取方法。在同一扫描线上，探针依次完成正向扫描（Trace）和反向扫描（Retrace）。由于动摩擦力方向始终与探针相对滑移方向相反，正、反向扫描获得的横向力信号通常具有相近幅值和相反极性。因此，将同一扫描位置处正、反向横向力信号差值的一半作为该位置的摩擦力，其计算公式如下：

$$F_f = \frac{\alpha}{2} |V_{\text{trace}} - V_{\text{retrace}}| \quad (1)$$

式中： F_f 为摩擦力值（nN）； α 为经 Sader 法^[26]标定得到的横向力校准系数（nN/V）； V_{trace} 和 V_{retrace} 分别为正向与反向扫描过程中四象限探测器记录的横向偏转电压信号。



(a) Schematic diagram of the AFM instrument

(b) Schematic diagram of probe slippage

图 4 AFM 摩擦测试装置及探针在加捻碳纳米管纤维表面滑移模型示意图

Fig.4 AFM friction measurement setup and probe sliding model on a twisted carbon nanotube fiber surface

1.3 分子动力学模拟研究

为从原子尺度分析表面角对碳纳米管纤维摩擦行为的影响,本研究借助 LAMMPS 开展分子动力学模拟。模拟体系由具有不同表面角的碳纳米管纤维和球形刚性探针组成。碳纳米管纤维模型由 7 根平行排列的单壁碳纳米管构成,其中 1 根位于中心,其余 6 根均匀分布在中心碳纳米管周围,形成近似六方排列的管束结构。单根碳纳米管为扶手椅型 (6,6) 单壁碳纳米管,直径约为 0.81 nm。模型轴向长度约为 17 nm,纤维外轮廓半径约为 1.6 nm,共包含 11928 个碳原子。通过对外围碳纳米管的原子坐标施加绕纤维轴线的螺旋几何变换,使其中心线沿轴向发生连续旋转,从而分别构建表面角为 10°、20°和 30°的碳纳米管纤维模型。不同表面角模型采用相同的碳纳米管数量、手性及初始截面排列方式,以降低模型尺寸差异对摩擦响应的影响。球形刚性探针半径为 1.5 nm,模拟体系采用三维非周期性边界条件。碳纳米管内部碳原子之间的共价相互作用采用修正的 AIREBO-M 势函数描述,以避免高接触应力和大剪切变形条件下的非物理键断裂;探针与碳纳米管纤维之间的非键合范德华相互作用采用经典 12-6 Lennard-Jones 势函数描述。考虑到实验中 20°样品表现出较高摩擦力,而 30°样品摩擦力明显降低,模拟选取 10°、20°和 30°三种典型表面角进行对比分析。45°样品在实验中表现出一定摩擦回升,但其表面结构可能涉及更强的径向压实、局部褶皱和复杂管束重排,在当前纳米尺度模型中由于尺度限制,未进行 45°模拟。

在动力学弛豫与摩擦滑移过程中,模拟体系根据空间位置划分为固定约束区域和自由运动区域。底部原子设置为固定层,用于提供基底支撑;中间区域采用 NVT 系综并保持温度为 300 K,用于耗散摩擦滑移过程中产生的热量;顶部区域采用 NVE 系综自由演化,以表征探针滑移过程中纤维表层原子的局部位移和重排行为。模型底部设置厚度为 20 Å 的固定支撑区域,用于限制纤维整体位移;同时,在纤维两端沿 Z 方向分别设置厚度为 6 Å 的固定区域,用于约束端部原子的运动并保持加捻结构稳定。除上述区域外,其余碳原子作为自由运动区域参与摩擦过程中的变形、重排及能量传递行为。

摩擦模拟过程中,探针对碳纳米管纤维表面施加恒定法向载荷,载荷分别为 1、2、4、6 和 8 nN,并以 0.2 Å/ps,即 20 m/s 的恒定速度沿垂直于纤维轴向的方向滑移。总模拟时间为 500 ps,系统每隔 1 ps 记录一次探针所受横向力,并通过稳态滑移阶段的平均横向力表征不同表面角下的摩擦响应。需要说明的是,分子动力学模拟中的滑移速度显著高于 AFM 实验中的探针扫描速度。这一差异来源于原子尺度模拟可达到的时间尺度限制。较高的滑移速度可能增强界面非平衡响应、瞬态局部变形和黏滑过程中的剪切阻力,因此本文不将模拟摩擦力与 AFM 实验摩擦力进行绝对数值对应。模拟结果主要用于比较不同表面角模型之间的相对摩擦力变化趋势,并辅助解释表面角改变界面接触状态和局部结构刚度的微观机制。

2 结果与讨论

2.1 样品表面摩擦力的二维空间分布特征

AFM 区域扫描可同步获得纤维表面形貌与横向摩擦力分布,用于分析不同表面角下摩擦响应的空间差异。图 5 展示了 10°、20°、30°和 45°样品在 X、Y 方向扫描下的平均摩擦力随法向载荷的变化关系。其中,X 方向近似垂直于纤维轴向,Y 方向近似平行于纤维轴向。

由图 5 可见,在同一表面角下,摩擦力随法向载荷增加而升高,表明较高法向载荷增强了探针-纤维界面的接触作用和剪切阻力。同时,X 方向摩擦力整体高于 Y 方向,表明螺旋碳纳米管纤维表面具有明显的摩擦各向异性。这主要与表层管束取向有关:探针沿 X 方向滑移时需要跨越管束取向和沟槽起伏,受到较强的侧向阻碍;而沿 Y 方向滑移时更接近顺管束方向,界面阻力相对较低。

为进一步定量评价不同表面角 CNT 纤维的摩擦响应, 本文基于不同法向载荷下的稳态摩擦力数据计算等效摩擦系数。由于纳米尺度接触过程中存在黏附力和界面非均匀性, 摩擦力与法向载荷之间采用非过原点线性关系进行拟合:

$$F_f = kF_N + b \quad (2)$$

其中, F_f 为稳态摩擦力, F_N 为法向载荷, k 为拟合斜率, b 为截距。本文定义拟合斜率 k 为等效摩擦系数:

$$\mu_{eq} = k \quad (3)$$

图 6 进一步给出了区域扫描条件下平均摩擦力和等效摩擦系数随表面角的变化关系。由图 6(a)、(b) 可见, 在不同法向载荷下, X、Y 方向平均摩擦力均随表面角变化呈现非单调特征。表面角由 10° 增至 20° 时, 摩擦力总体升高; 继续增至 30° 时, 摩擦力明显降低; 当表面角增至 45° 时, 摩擦力出现一定程度回升。其中, 20° 样品整体表现出较高摩擦力, 表明该表面角下探针滑移受到较强界面阻力。

图 6(c)、(d) 为由摩擦力-法向载荷关系线性拟合得到的等效摩擦系数。等效摩擦系数反映区域扫描条件下摩擦力对法向载荷的响应敏感性。结果显示, X 方向等效摩擦系数由 10° 时的 0.16 增至 20° 时的 0.56, 随后在 30° 时降至 0.14, 并在 45° 时回升至 0.28; Y 方向也呈现相似变化规律, 在 20° 时达到较高值 0.43。该结果表明, 20° 样品不仅具有较高的平均摩擦力, 而且其摩擦力随法向载荷增加的增长幅度更大, 说明适度加捻能提高表层管束的接触稳定性和界面剪切阻力。

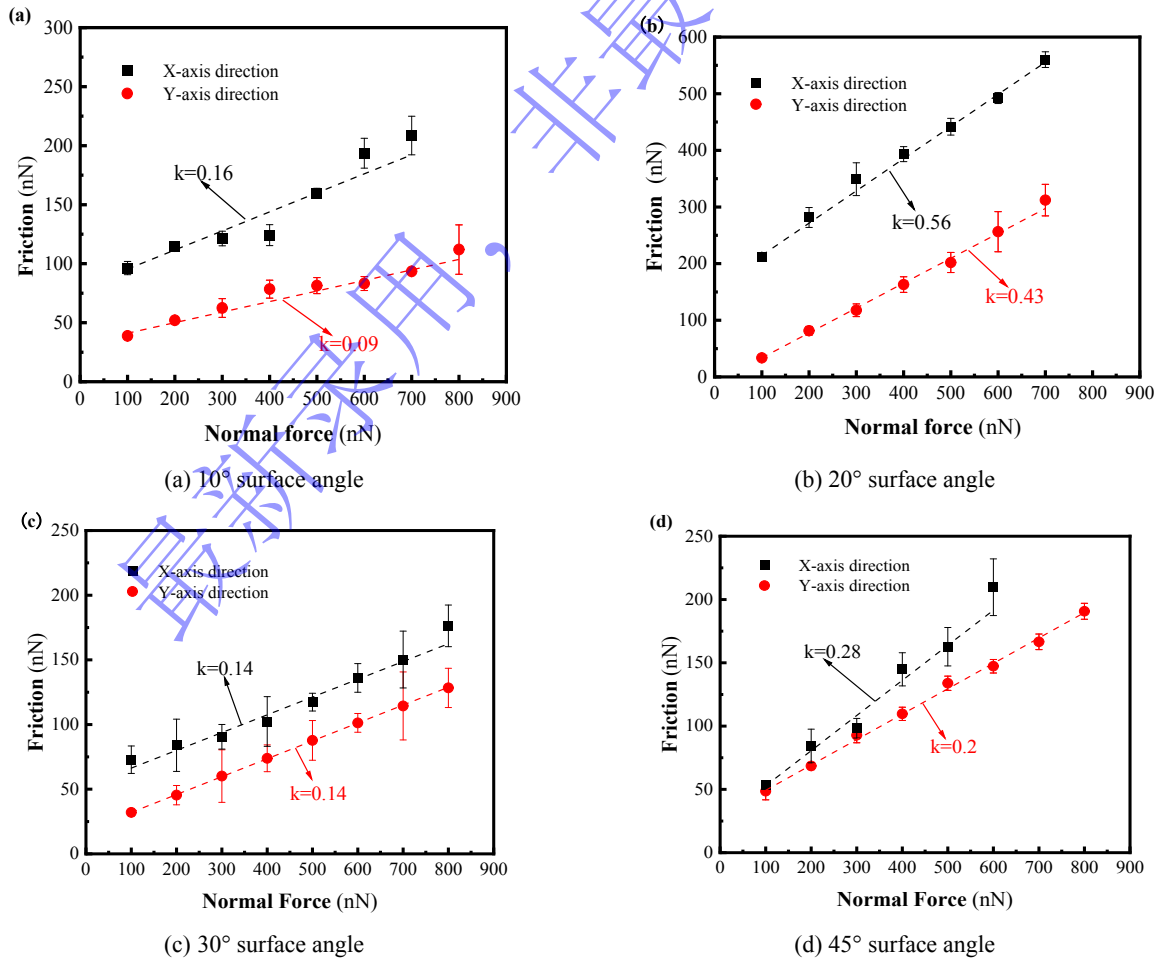


图 5 不同表面角碳纳米管纤维的表面摩擦力分布

Fig.5 Surface friction force distributions of carbon nanotube fibers with different surface angles

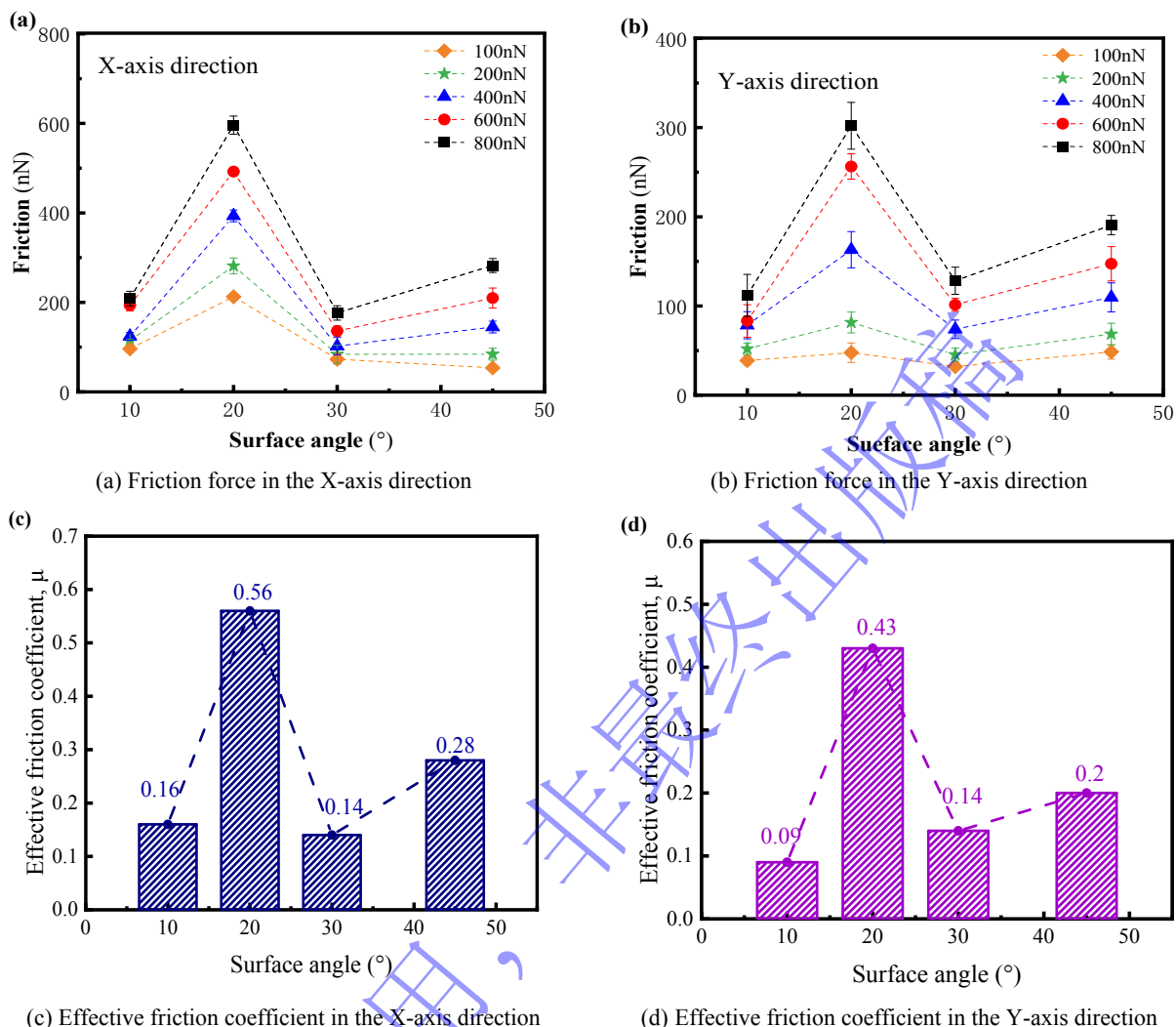


图 6 不同表面角碳纳米管纤维在 X、Y 方向区域扫描下的摩擦力及等效摩擦系数

Fig.6 Friction force and effective friction coefficient of carbon nanotube fibers with different surface angles under X、Y

2.2 梯度法向载荷下的摩擦特性

区域扫描反映的是较大区域内的统计摩擦响应，而局域滑移测试可进一步揭示固定路径上摩擦力对法向载荷的响应规律。图 7 展示了不同表面角碳纳米管纤维在梯度法向载荷下的局域滑移摩擦响应。本研究中，梯度法向载荷是指在同一扫描线上不断改变法向载荷。其电信号的大小直接对应了摩擦力的大小。随着法向载荷增加，各样品摩擦力整体升高，说明局部接触区的剪切阻力随载荷升高而增强。不同表面角样品的摩擦力分布存在明显差异，表明局部管束排列和表面起伏会影响探针滑移过程的接触状态。

图 8(a)给出了不同表面角样品的摩擦力-法向载荷关系。可以看出，摩擦力随法向载荷增加基本呈上升趋势。图 8(b)进一步比较了相同法向载荷下摩擦力随表面角的变化，结果显示 20°样品整体表现出较高摩擦力，30°样品相对较低，与区域扫描结果基本一致。这说明适度表面角有利于增强局部滑移过程中的摩擦阻力，而较大的表面角可能使局部接触趋于离散化，从而削弱摩擦响应。

图 8(c)为局域滑移测试得到的等效摩擦系数。10°、20°、30°和 45°样品的等效摩擦系数分别约为 0.12、0.04、0.10 和 0.07。需要指出的是，该等效摩擦系数由固定滑移路径上的摩擦力-法向载荷拟合

斜率获得, 主要反映局部接触区域内摩擦力对法向载荷的敏感性, 不能单独作为评价材料整体摩擦强弱的指标。20°样品虽然表现出较高摩擦力, 但其拟合斜率较低, 说明该样品在较低载荷下可能已形成较稳定的界面接触和黏附作用, 后续载荷增加引起的摩擦力增幅相对有限。

需要指出的是, 局域滑移测试得到的等效摩擦系数与区域扫描测试中的等效摩擦系数具有不同物理含义。区域扫描测试反映 $4\ \mu\text{m} \times 4\ \mu\text{m}$ 区域内大量微接触点的统计平均响应, 法向载荷升高时, 更多表层管束、沟槽侧壁和局部起伏区域参与接触, 因此拟合斜率不仅反映界面剪切强度, 也包含接触面积和有效接触点数量随载荷增加的贡献。相比之下, 局域滑移测试沿固定路径进行, 其摩擦力-载荷斜率更敏感于该路径上的初始接触状态、局部黏附和表面起伏。20°样品虽然在局域滑移测试中表现出较高的摩擦力水平, 但其低载荷阶段已形成较稳定的接触和较明显的黏附/剪切阻力, 导致后续载荷增加时摩擦力增幅相对有限, 从而得到较低的局域等效摩擦系数。因此, 20°样品在区域扫描中具有较高等效摩擦系数、而在局域滑移中具有较低拟合斜率, 并不代表结论矛盾, 而是反映了区域统计摩擦响应与固定路径局部摩擦响应之间的尺度和路径差异。

在区域扫描摩擦测试中, 法向载荷设置为 100、200、300、400、500、600、700 和 800 nN, 用于获得不同载荷下的二维摩擦力分布及平均摩擦响应。局域滑移测试中, 探针沿固定路径进行往复滑移, 并施加梯度法向载荷, 载荷范围为 50-400 nN, 用于分析局部接触区域内摩擦力随法向载荷的变化规律。所有载荷条件下均保持相同扫描方向 and 数据处理方法, 以保证不同表面角样品之间的可比性。

因此, 局域滑移测试与区域扫描结果具有互补性: 区域扫描反映纤维表面的整体统计摩擦响应, 局域滑移测试则更敏感于固定路径上的局部形貌和接触状态。

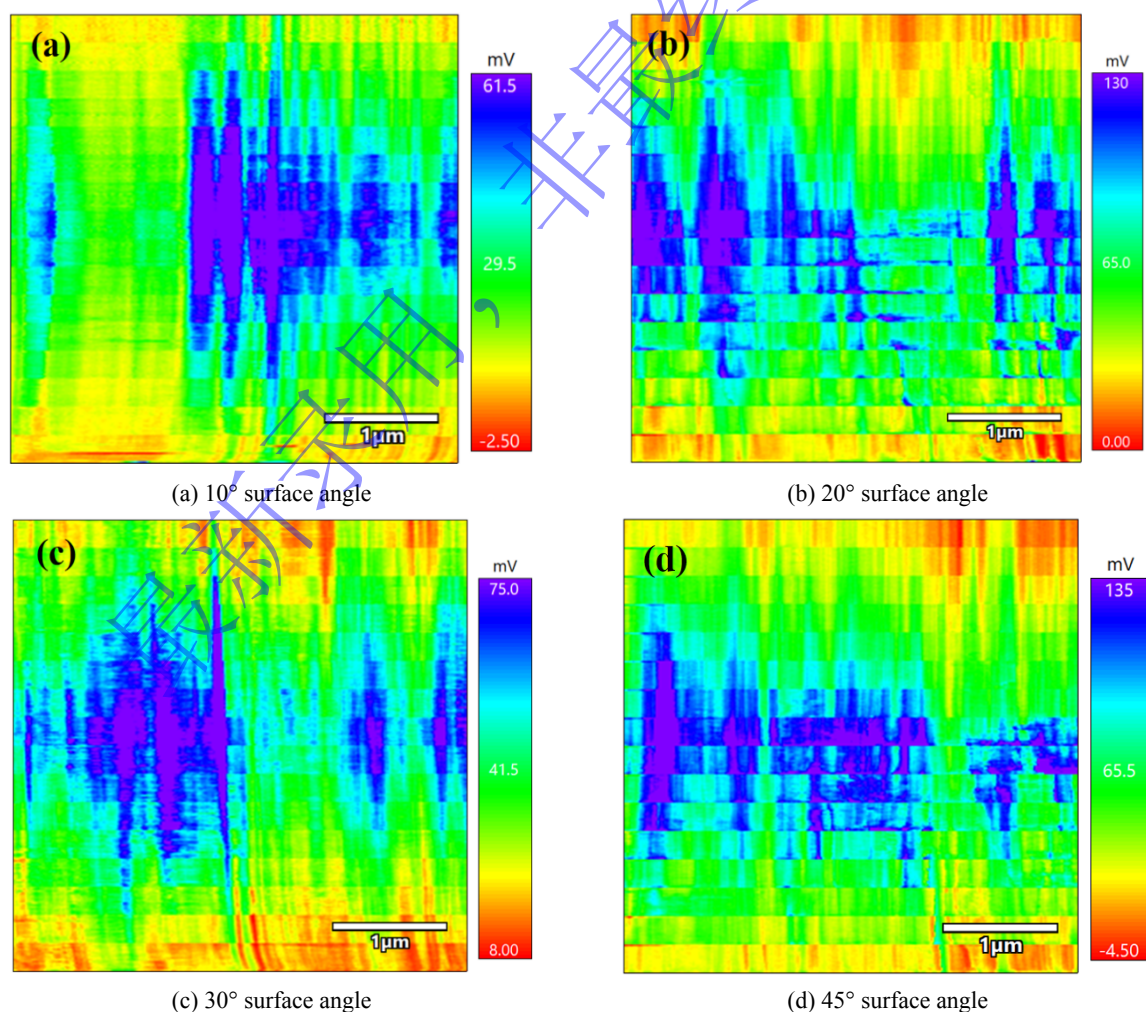


图 7 不同表面角碳纳米管纤维在梯度法向载荷下的局域滑移摩擦响应

Fig.7 Local sliding friction response of carbon nanotube fibers with different surface angles under gradient normal loads

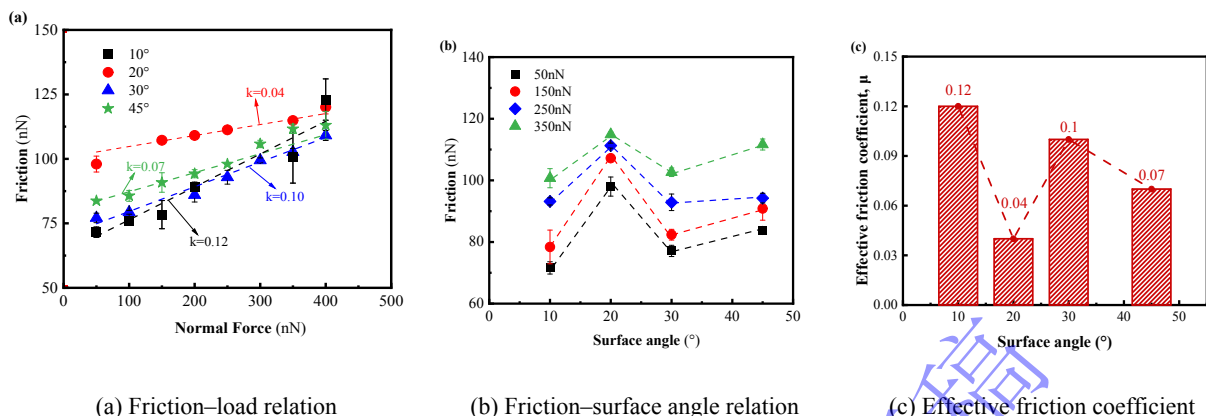


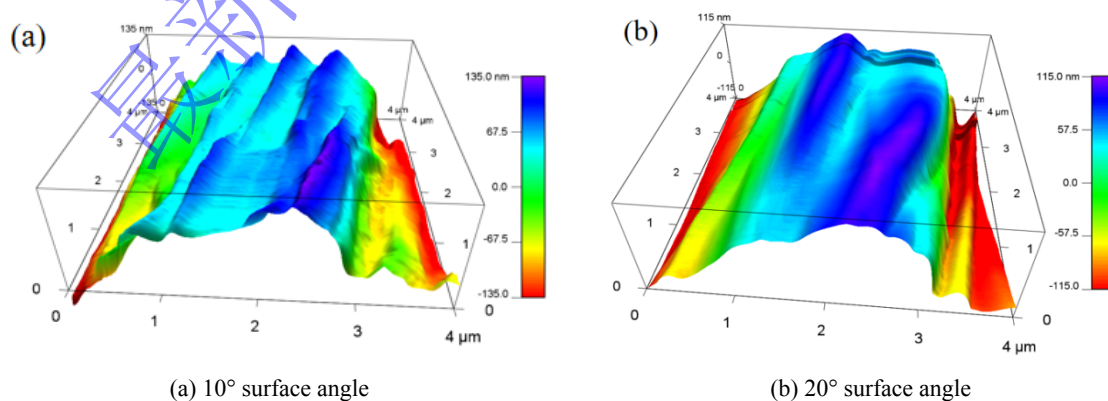
图 8 局域滑移测试中碳纳米管纤维摩擦力及等效摩擦系数随法向载荷和表面角的变化关系

Fig.8 Variation of friction force and effective friction coefficient of carbon nanotube fibers with normal load and surface angle in local sliding tests

2.3 表面形貌与摩擦响应的关联

表面形貌通过影响 AFM 探针与碳纳米管纤维表面的接触状态影响摩擦力变化。图 9 展示了 AFM 扫描螺旋碳纳米管纤维表面的三维形貌。可以看出，纤维表面并非理想平整界面，而是由碳纳米管束构成，表面存在明显的起伏结构和沟槽特征。

图 10 给出了 AFM 探针滑移前后不同表面角碳纳米管纤维表面形貌的 SEM 图像。**SEM 结果显示**，探针滑移后纤维表面局部区域出现一定程度的形貌扰动。图 11 进一步给出了不同表面角样品的 AFM 高度图。结合 SEM 图像和 AFM 高度图可以看出，不同表面角下纤维表层管束排列状态和局部起伏程度存在明显差异。基于 AFM 高度图提取同一扫描路径下的高度剖面，并与摩擦力曲线进行对比，结果如图 12 所示。随着表面角由 10°增加至 45°，纤维表面形貌高度差呈现先减小、后增大、再减小的非单调变化。10°样品中表层管束排列较松散，束间孔隙和沟槽较明显，因而高度差较大；20°样品中表层管束在加捻作用下趋于压实，表面较为平整，高度差降低^[23]；30°样品中较大的扭转变形可能诱发表层管束局部屈曲、错动或二次重排^[27]，使表面起伏重新增大；45°样品中径向压实和管束间约束进一步增强^[28]。



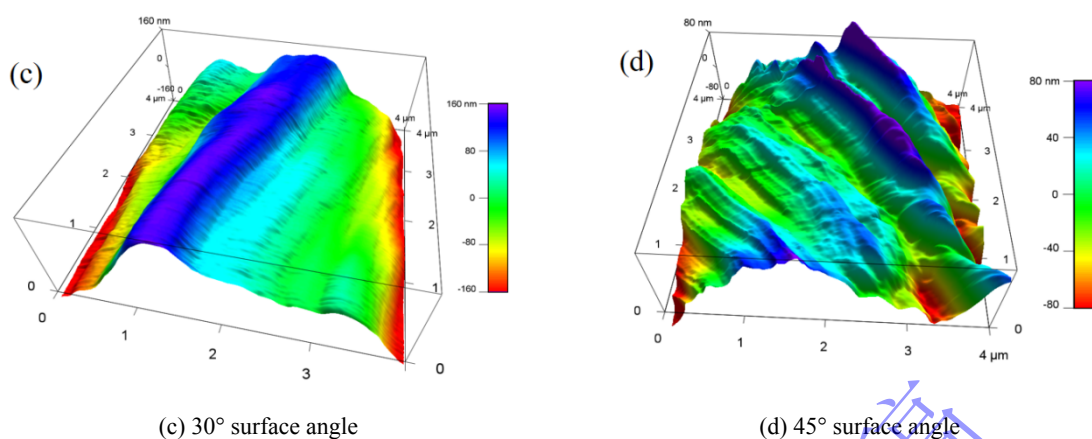


图 9 AFM 扫描加捻碳纳米管纤维表面三维形貌图

Fig.9 Three-dimensional AFM surface morphology of twisted carbon nanotube fibers

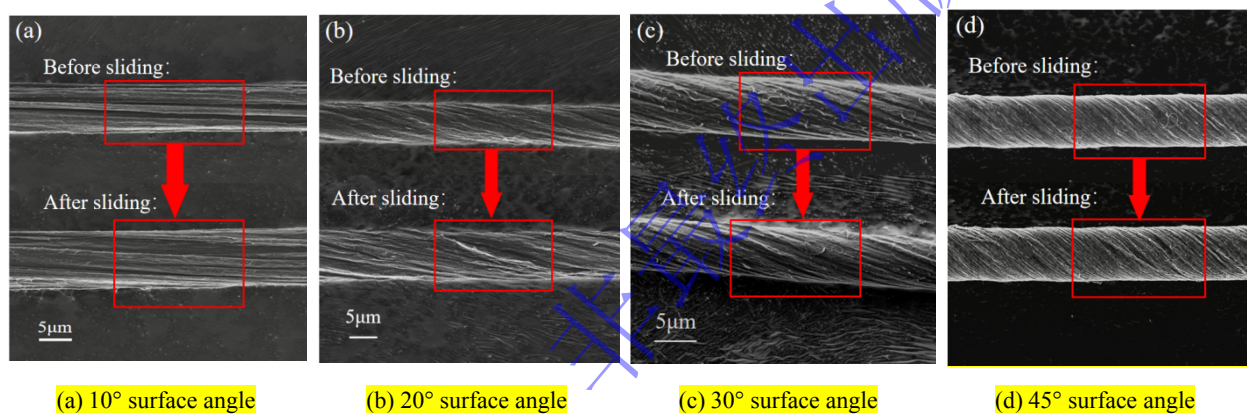
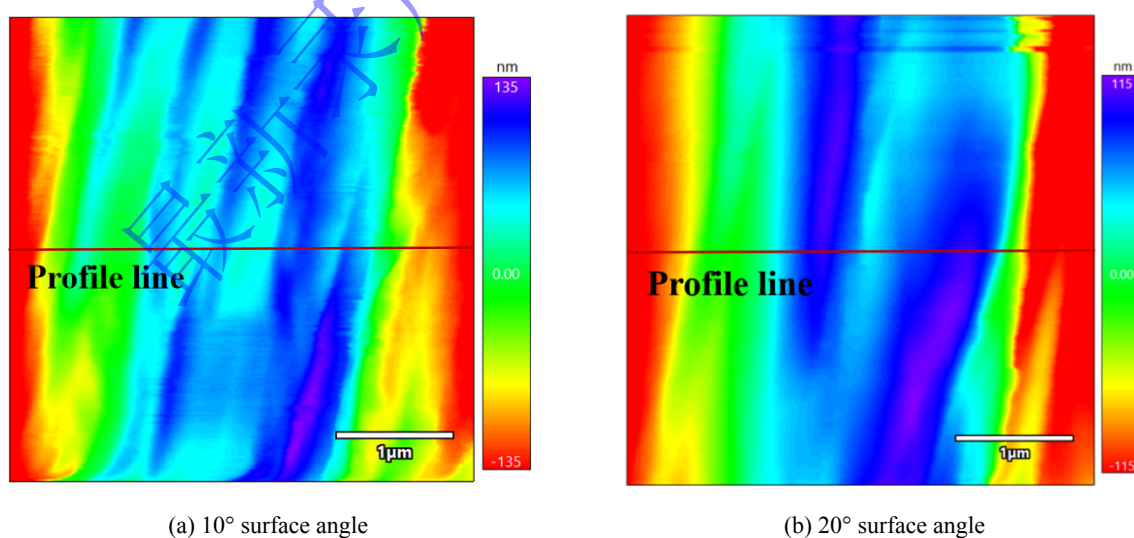
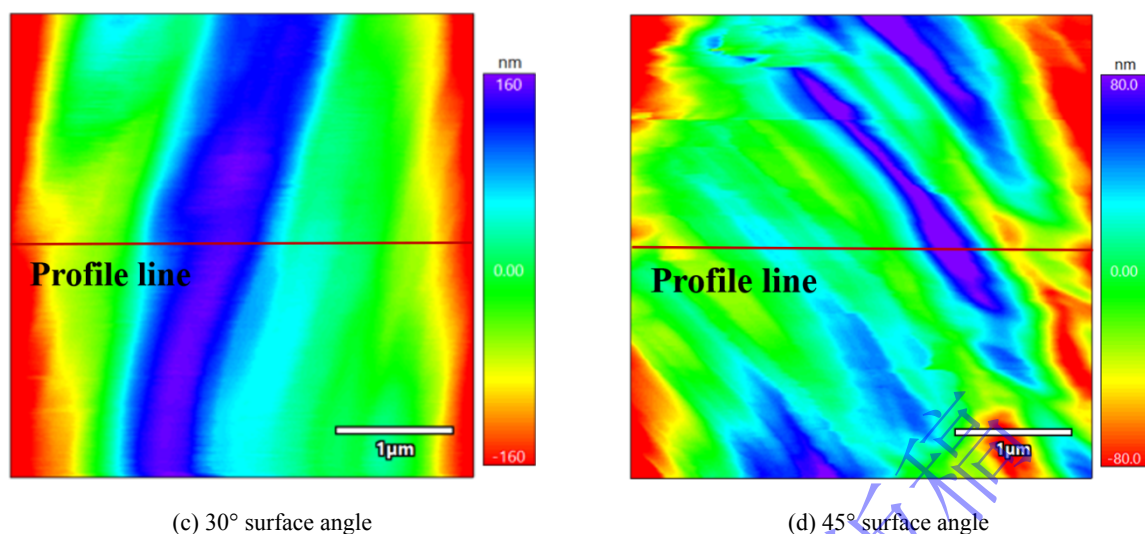


图 10 AFM 探针滑移前后加捻碳纳米管纤维表面形貌的 SEM 表征

Fig.10 SEM characterization of surface morphology of carbon nanotube fibers before and after AFM probe sliding





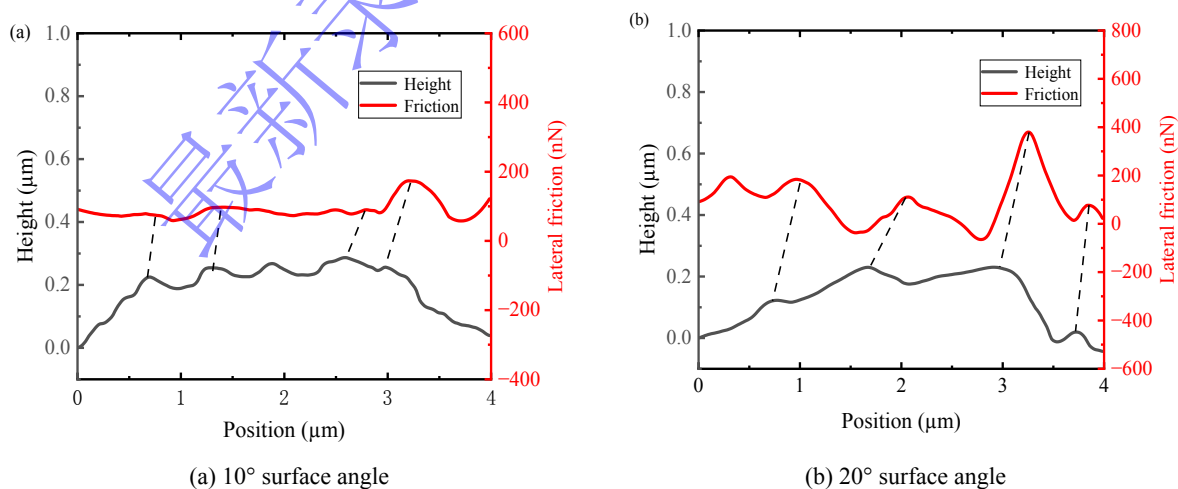
(c) 30° surface angle (d) 45° surface angle

图 11 不同表面角碳纳米管纤维表面形貌的 AFM 高度图及中部剖面提取路径

Fig.11 AFM height maps of surface morphology of carbon nanotube fibers with different surface angles and the middle path for height profile extraction

图 12 展示了同一扫描路径下表面高度和摩擦力信号的同步变化关系。可以观察到，部分高度起伏区域与摩擦响应增强区域具有一定空间对应性，说明表面形貌变化会影响探针-纤维之间的局部接触状态。然而，由于纳米尺度接触过程中摩擦响应还受到真实接触面积、管束排列以及界面黏附作用影响，形貌峰值与摩擦峰值并不呈现严格的一一对应关系。因此，表面高度变化应被视为调控摩擦行为的重要因素之一，而非唯一决定因素。这种形貌-摩擦的响应与微纳尺度摩擦中表面形貌和接触状态共同调控摩擦行为的认识一致^[29-31]。

对于低表面角样品，表层管束排列相对松散，束间孔隙和沟槽较明显，探针与表面管束之间的接触更容易呈现离散化特征，因此较大的形貌起伏并不必然对应较高摩擦力。当表面角增至 20°时，表层管束在加捻作用下趋于压实，探针滑动过程中更容易形成相对稳定的局部接触，从而表现出较高的平均摩擦力。随着表面角进一步增大，局部屈曲、错动或二次重排可能使接触状态重新趋于离散化，导致摩擦响应发生变化。



(a) 10° surface angle

(b) 20° surface angle

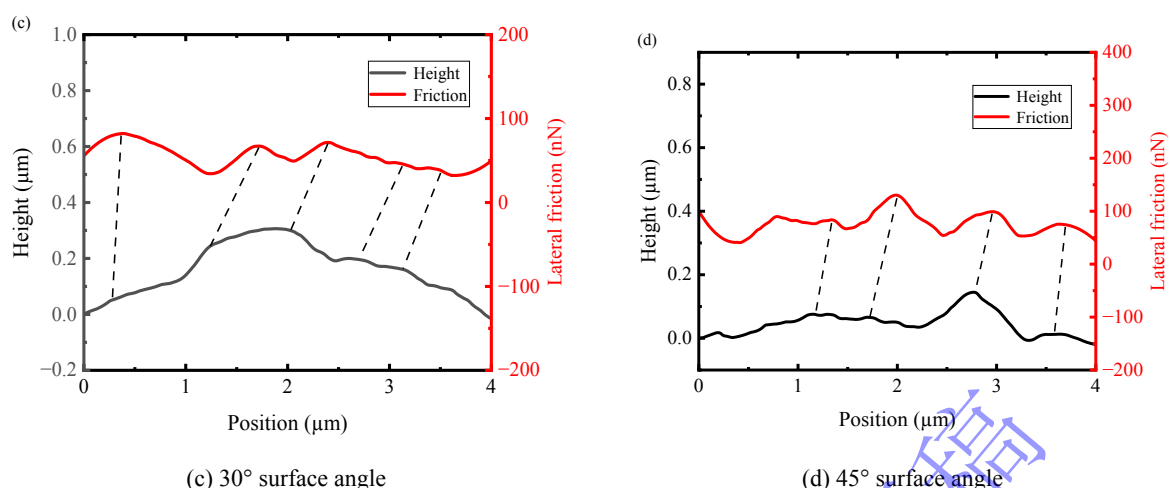


图 12 不同表面角碳纳米管纤维表面高度分布与摩擦响应关系

Fig.12 Relationship between surface height distribution and friction response of twisted carbon nanotube fibers with different surface angles

2.4 分子动力学模拟分析

为从原子尺度进一步解释表面角对摩擦响应的影响, 本文对 10° 、 20° 和 30° 三种表面角进行了分子动力学模拟。图 13(a) 给出了 10° 、 20° 和 30° 纤维表面探针滑移过程的原子轨迹, 图 13(b) 为相应的模拟摩擦力结果。由图 13(b) 可以看出, 20° 模型表现出相对较高的摩擦响应, 与 AFM 实验中 20° 附近摩擦力较高的趋势一致, 说明适度表面角下探针与表层管束之间可能形成更稳定的界面接触, 并产生较强的局部剪切阻力。

为分析不同表面角下摩擦力差异的来源, 本研究进一步统计了稳态滑移阶段探针与碳纳米管纤维之间的有效接触原子数和局部结构刚度, 如图 14 所示。有效接触原子数用于表征滑移过程中参与探针-纤维界面作用的原子数量, 局部结构刚度则反映纤维表层管束抵抗局部变形和剪切扰动的能力。需要指出的是, 摩擦力并不简单取决于有效接触原子数, 而是受接触稳定性、局部结构刚度和界面势垒等因素共同影响^[30,31]。

由图 14(a) 可见, 随着表面角由 10° 增加至 30° , 有效接触原子数整体呈下降趋势, 说明表面角改变了纤维表层管束的空间排列和探针-纤维界面的接触方式。 10° 模型中, 管束排列较为松散, 探针在滑移过程中可能与多个局部突起发生瞬时接触, 但这些接触较为离散, 难以形成持续稳定的剪切阻力。 20° 模型中, 适度加捻使表层管束发生压实和重排, 尽管有效接触原子数并非最高, 但接触状态更稳定, 因此仍表现出较高的摩擦响应。图 14(b) 表明, 20° 模型的局部结构刚度处于较高水平, 说明适度加捻可能增强表层管束抵抗局部变形和剪切扰动的能力。 20° 模型较高的摩擦响应并非简单来源于接触原子数增加, 也与接触稳定性和局部结构刚度提高有关。当表面角进一步增至 30° 时, 过度扭转可能诱发表层管束局部屈曲、错动或二次重排, 使接触状态重新趋于离散化, 从而削弱摩擦响应。

不同表面角下形貌高度与摩擦力之间的对应关系如图 15 所示。可以看出, 模拟得到的高度曲线与摩擦力曲线并未完全同步变化^[32], 这表明, 在原子尺度下, 摩擦响应并不是表面高度的直接函数。对于螺旋碳纳米管纤维而言, 形貌高点通常对应管束顶部区域, 探针与其接触时有效接触作用和侧向约束可能有限, 因此横向阻力相对较低; 而在形貌低谷或管束间沟槽区域, 探针可能同时受到相邻管束侧壁作用, 局部范德华相互作用和侧向限域增强, 并伴随管束弯曲、错动或重排, 从而产生更高的摩擦阻力^[32-34]。

综合图 13-图 15 可知, 表面角通过改变碳纳米管纤维表层管束的排列方式、压实程度和局部结构刚度, 影响探针滑移过程中的界面接触状态和摩擦阻力。分子动力学模拟为 AFM 实验中观察到的

非单调摩擦响应提供了原子尺度解释, 说明该响应并非单纯由表面高度起伏控制, 而是与有效接触状态、局部结构刚度、侧向限域和管束重排行为密切相关。

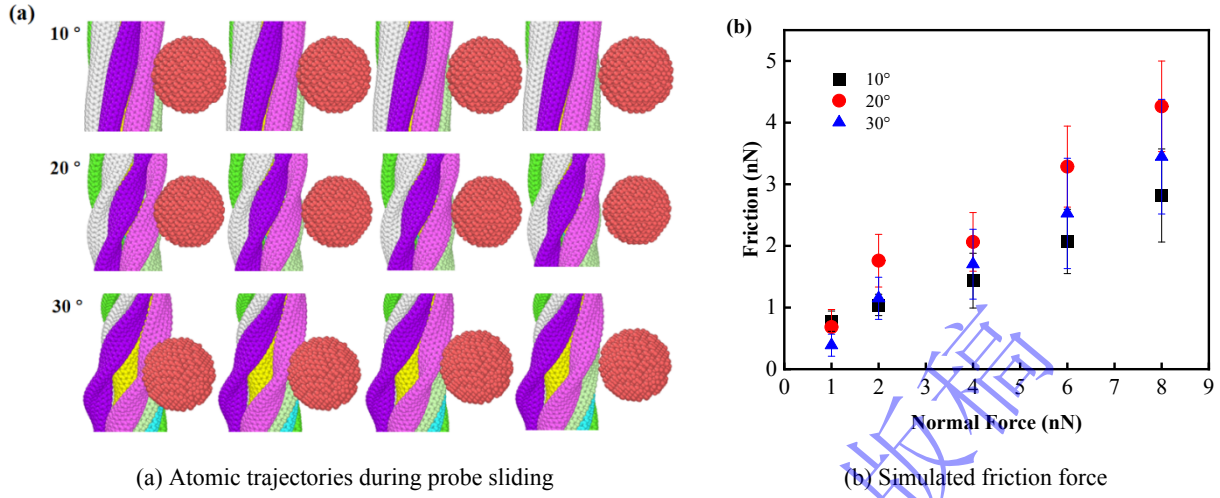


图 13 探针滑移过程的原子轨迹及模拟摩擦力结果

Fig.13 Atomic trajectories during probe sliding and simulated friction force

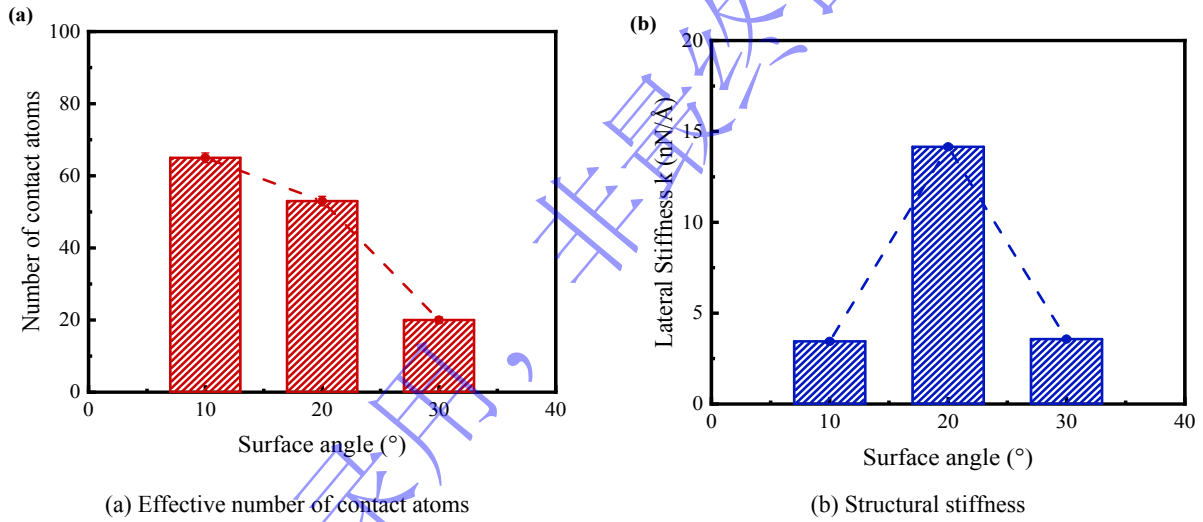


图 14 不同表面角下的有效接触原子数与结构刚度

Fig.14 Effective number of contact atoms and structural stiffness at different surface angles

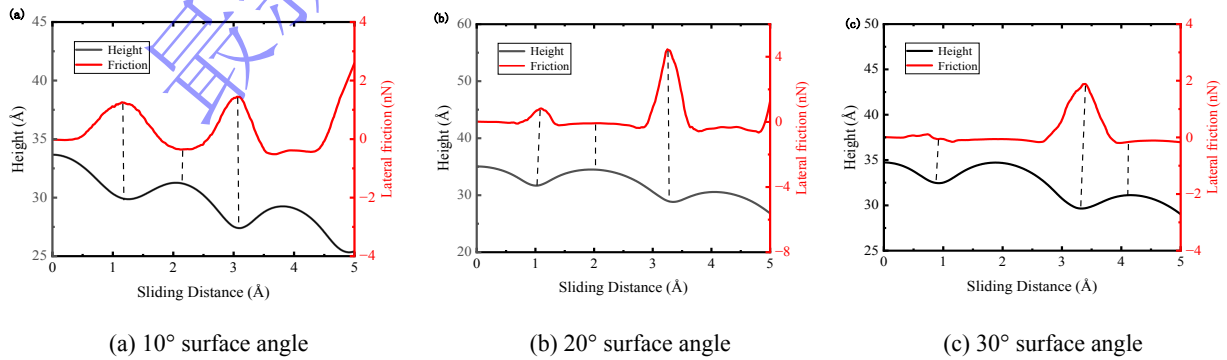


图 15 分子动力学模拟不同表面角形貌高度与摩擦力关系

Fig.15 Relationship between morphology height and friction force at different surface angles obtained from molecular dynamics simulations

此外, 由于 MD 模拟滑移速度高于 AFM 实验速度, 模拟体系中局部结构响应可能更接近高应变率条件下的瞬态剪切过程。因此, 本文仅将 MD 结果作为对不同表面角界面接触稳定性和局部结构响应差异的定性或半定量分析, 而不将其用于推算实验条件下的绝对摩擦力。

还应注意, MD 模型的长度和半径均远小于实验中微米尺度的碳纳米管纤维, 因此模拟体系不能完全包含实验样品中的长程螺旋周期、跨尺度孔隙、管束缺陷和表面非均匀性。模型中的表面角主要作为局部管束取向和接触几何的表征参数, 用于分析纳米探针作用下局部界面接触、侧向限域和结构响应的差异。尺度缩小可能会改变纤维的等效刚度、局部曲率和接触离散性, 因此本文仅将 MD 结果用于解释不同表面角下摩擦响应的相对变化趋势, 而不将其视为实验纤维全尺度摩擦行为的完全等效模型。

3 结论

本文结合 AFM 摩擦实验与分子动力学模拟, 研究了表面角对螺旋碳纳米管纤维动摩擦行为的影响。主要结论如下:

(1) 螺旋碳纳米管纤维的表面摩擦力随法向载荷增加而升高, 并表现出各向异性。垂直于纤维轴向方向的摩擦力高于平行纤维轴向方向, 说明螺旋结构取向影响界面滑移行为。

(2) 表面角对摩擦响应具有非单调调控作用。随着表面角由 10° 增加至 45° , 平均摩擦力整体呈现先升高、后降低、再回升的变化趋势, 其中 20° 样品表现出较高的摩擦响应及区域扫描等效摩擦系数, 表明适度加捻有利于增强界面接触稳定性与剪切阻力。

(3) 不同测试尺度下的摩擦响应存在差异。区域扫描结果反映区域统计平均行为, 而局域滑移结果更敏感于固定路径上的局部接触状态与黏附作用, 因此两种测试方法得到的等效摩擦系数需结合统计尺度进行理解。

(4) 分子动力学模拟与表面形貌分析表明, 表面角通过调控管束排列与界面接触状态影响摩擦行为, 其本质来源于结构重排与界面相互作用的共同作用。

参考文献

- [1] 苏子涵, 李翔宇, 梁民族, 等. 聚氨酯胶体含量对预浸 PBO 纤维复合板弹道性能的影响[J/OL]. 高压物理学报, 2026. DOI:10.11858/gywlxb.20261034.
- [2] 朱雨璇, 蔡凤娇, 刘志成, 等. 织物结构混杂纤维增强复合材料的抗侵彻性能[J]. 高压物理学报, 2025, 39(11):110111. DOI:10.11858/gywlxb.20251179.
- [3] Naik N K, Shrirao P. Composite structures under ballistic impact[J]. Composite Structures, 2004, 66(1-4):579-590. DOI:10.1016/j.compstruct.2004.05.006.
- [4] 周志鹏, 曹辉, 付琼, 等. 爆炸破片冲击下碳纤维复合材料的吸能性能和失效机制数值模拟[J]. 高压物理学报, 2025, 39(7): 074204. DOI: 10.11858/gywlxb.20240882.
- [5] Abtew M A, Boussu F, Bruniaux P, et al. Ballistic impact mechanisms-a review on textiles and fibre-reinforced composites impact responses[J]. Composite Structures, 2019, 223:110966. DOI:10.1016/j.compstruct.2019.110966.
- [6] 曲韵翔, 王鹏飞, 武扬帆, 等. 纤维缠绕的黏滑特性及其界面动摩擦[J]. 高压物理学报, 2025, 39(8): 084102. DOI: 10.11858/gywlxb.20240953.
- [7] Baughman R H, Zakhidov A A, de Heer W A. Carbon nanotubes-the route toward applications[J]. Science, 2002, 297(5582):787-792.
- [8] Jiang K, Li Q, Fan S. Spinning continuous carbon nanotube yarns[J]. Nature, 2002, 419(6909): 801.

- [9] Zhang M, Atkinson K R, Baughman R H. Multifunctional carbon nanotube yarns by downsizing an ancient technology[J]. *Science*, 2004, 306(5700):1358-1361.
- [10] Salvétat J P, Bonard J M, Thomson N H, et al. Mechanical properties of carbon nanotubes[J]. *Applied Physics A*, 1999, 69(3):255-260.
- [11] Popov V N. Carbon nanotubes: properties and application[J]. *Materials Science and Engineering: R: Reports*, 2004, 43(3):61-102.
- [12] Zhai W, Srikanth N, Kong L B, et al. Carbon nanomaterials in tribology[J]. *Carbon*, 2017, 119:150-171.
- [13] Meng H, Sui G X, Xie G Y, et al. Friction and wear behavior of carbon nanotubes reinforced polyamide 6 composites under dry sliding and water lubricated condition[J]. *Composites Science and Technology*, 2009, 69(5):606-611.
- [14] Miao Y, Cheng Z, Chen X, et al. Tribological properties of carbon nanotube/polymer composites: a mini-review[J]. *Frontiers in Materials*, 2023, 10:1129676.
- [15] Zhang X. Interfacial mechanical behaviors in carbon nanotube assemblies[J]. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2017, 50(20):203001.
- [16] Zhang X, Li Q. Enhancement of friction between carbon nanotubes: an efficient strategy to strengthen fibers[J]. *ACS Nano*, 2010, 4(1):312-316.
- [17] Lucas M, Zhang X, Palaci I, et al. Hindered rolling and friction anisotropy in supported carbon nanotubes[J]. *Nature Materials*, 2009, 8(11):876-881.
- [18] Chiu H C, Ritz B, Kim S, et al. Sliding on a nanotube: interplay of friction, deformations and structure[J]. *Advanced Materials*, 2012, 24(21):2879-2884.
- [19] Kinoshita H, Kume I, Tagawa M, et al. Microtribological property of vertically aligned carbon nanotube film[J]. *Carbon*, 2008, 46(2): 411-414.
- [20] Turq V, Ohmae N, Martin J M, et al. Influence of humidity on microtribology of vertically aligned carbon nanotube film[J]. *Tribology Letters*, 2005, 19(1): 23-28.
- [21] Lu H, Goldman J, Ding F, et al. Friction and adhesion properties of vertically aligned multi-walled carbon nanotube arrays and fluoro-nanodiamond films[J]. *Carbon*, 2008, 46(10):1294-1301. DOI:10.1016/j.carbon.2008.05.010.
- [22] Alirezazadeh A, Zarrebini M, Payvandy P, et al. Fiber-on-fiber friction measurement using hanging fiber method[J]. *The Journal of The Textile Institute*, 2018, 109(5): 636-646.
- [23] Shang Y, Wang Y, Li S, et al. High-strength carbon nanotube fibers by twist-induced self-strengthening[J]. *Carbon*, 2017, 119:47-55. DOI:10.1016/j.carbon.2017.03.101.
- [24] Anike J C, Belay K, Abot J L. Effect of twist on the electromechanical properties of carbon nanotube yarns[J]. *Carbon*, 2019, 142: 491-503.
- [25] Singh J, Singh D, Sutaria M. Ceramic composites: roles of fiber and interface[J]. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, 1999, 30(4): 445-450.
- [26] Sader J E, Chon J W M, Mulvaney P. Calibration of rectangular atomic force microscope cantilevers[J]. *Review of Scientific Instruments*, 1999, 70(10):3967-3969. DOI:10.1063/1.1150021.
- [27] 袁强飞. 碳纳米管在简单和组合载荷下的屈曲行为研究[D]. 武汉: 华中科技大学, 2011.
- [28] 武扬帆. 螺旋纤维层级结构微力学演化及微器件驱动设计应用[D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2025.
- [29] Sung I H, Lee H S, Kim D E. Effect of surface topography on the frictional behavior at the micro/nano-scale[J]. *Wear*, 2003, 254(10): 1019-1031.

- [30] Paci J T, Belytschko T, Schatz G C. Shear and friction between carbon nanotubes in bundles and yarns[J]. Nano Letters, 2014, 14(11): 6138-6147.
- [31] Hölscher H, Ebeling D, Schwarz U D. Friction at atomic-scale surface steps: experiment and theory[J]. Physical Review Letters, 2008, 101(24): 246105.
- [32] Servantie J, Gaspard P. Translational dynamics and friction in double-walled carbon nanotubes[J]. Physical Review B, 2006, 73(12): 125428.
- [33] Zhao Y, Ma C C, Chen G, et al. Energy dissipation mechanisms in carbon nanotube oscillators[J]. Physical Review Letters, 2003, 91(17): 175504.
- [34] Wang F, Liu C, Yuan P, et al. Effect of compression on the enhancement of friction and strengthening of double-walled carbon nanotube bundles: a molecular dynamics study[J]. Computational Materials Science, 2012, 63:244-248. DOI:10.1016/j.commatsci.2012.06.002.

Dynamic Friction Behavior on the Surface of Twisted Carbon Nanotube Fibers

ZHANG Xinlu¹, WANG Pengfei¹, WANG Guorui¹, CHEN Xinan¹, XU Songlin¹

(1.Key Laboratory of Materials Mechanical Behavior and Design, University of Science and Technology of China, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230027, Anhui, China)

Abstract: Carbon nanotube (CNT) fibers have attracted considerable attention for applications in micro/nano devices, flexible electronics, and high-performance composites due to their outstanding mechanical and electrical properties. However, the influence of helical structures on the surface frictional behavior of CNT fibers remains poorly understood. In this study, helical CNT fibers with surface angles ranging from 10° to 45° were fabricated through a controllable spinning method. Their frictional responses under different normal loads were investigated by combining atomic force microscopy (AFM) experiments with molecular dynamics (MD) simulations. The results demonstrate that the friction force increases with increasing normal load and exhibits pronounced directional dependence. With increasing surface angle, the average friction force shows a non-monotonic variation, initially increasing, then decreasing, and finally increasing again, with the 20° sample exhibiting the highest friction response. Surface morphology analysis reveals that the surface angle regulates local structural characteristics of CNT fibers, which plays an important role in determining frictional behavior. MD simulations further indicate that the enhanced friction response of the 20° sample originates from more stable interfacial contact and stronger local structural resistance. The combined effects of twist-induced surface morphology evolution and changes in local contact states govern the dynamic friction behavior of CNT fibers. These findings provide microscopic insights into interfacial sliding-induced energy dissipation, friction regulation, and wear-resistant structural design of CNT fiber-reinforced composites for impact protection applications.

Keywords: carbon nanotube fiber; twisting; surface angle; AFM; dynamic friction; molecular dynamics simulation