

DOI:10.13296/j.1001-1609.hva.2026.07.017

铜基电触头石墨烯改性复合材料导热性能优化设计

王梦溪¹, 韩智云¹, 李俊科¹, 任瀚文¹, 李庆民¹, 丁 一²

(1. 华北电力大学新能源电力系统国家重点实验室, 北京 102206; 2. 国网智能电网研究院有限公司, 北京 102200)

摘要: 随着中国新能源电力系统向更高电压等级、大容量化方向发展, 断路器触头的服役性能受到了严峻的挑战, 其关键在于高能电弧所产生的热量积聚引起的表面烧蚀, 因此亟需设计高导热铜基复合材料以提高触头的抗烧蚀性能。石墨烯因其热性能突出被广泛应用于提升金属基复合材料的导热性能, 为此文中构建了不同石墨烯排列取向、尺寸以及层数的复合分子模型, 探究了温度和石墨烯掺杂结构参数对复合材料热导率的影响, 分析了石墨烯对复合材料导热性能的微观增强机制, 优化设计了更高抗烧蚀性能铜基复合材料并通过实验进行了验证。结果表明: 石墨烯复合材料的热导率与温度成反比, 但均高于纯铜基体热导率; 石墨烯排列取向与热流方向夹角处于 $0^{\circ}\sim 8.19^{\circ}$ 之间时能有效提高复合材料热导率; 复合材料热导率随石墨烯尺寸、层数增大而增大, 掺杂排列角度为 0° 、尺寸为 $378.84\text{ \AA}$ 的5层石墨烯时, 复合材料的热导率提升最为显著, 较纯铜模型提高了72.7%。文中可为工程上高性能铜基复合材料的优化设计提供理论指导与技术支持。

关键词: 断路器触头; 热导率; 石墨烯; 分子动力学模拟

Optimization Design for Thermal Conductivity of Graphene-modified Copper-based Electrical Contact Composite Materials

WANG Mengxi¹, HAN Zhiyun¹, LI Junke¹, REN Hanwen¹, LI Qingmin¹, DING Yi²

(1. State Key Lab of Alternate Electrical Power System with Renewable Energy Sources, North China Electric Power University, Beijing 102206, China; 2. State Grid Smart Grid Research Institute Co., Ltd., Beijing 102200, China)

Abstract: With the development of China's new energy power system toward higher voltage levels and larger capacities, the service performance of circuit breaker contacts faces severe challenges. The key problem is the surface ablation caused by heat accumulation generated by high-energy arcs. It is therefore necessary to design high thermal conductivity copper-based composite materials to enhance the ablation resistance of the contacts. Graphene is widely used to improve the thermal conductivity of metal matrix composites owing to its exceptional thermal properties. Accordingly, in this study a composite molecular model featuring various graphene arrangement orientations, dimensions and layer counts is set up. The influence of temperature and graphene doping structural parameters on the thermal conductivity of composites is explored, the microscopic enhancement mechanism of graphene on the thermal conductivity of composites is analyzed, and the copper-based composites with higher ablation resistance are optimally designed and experimentally verified. The results show that the thermal conductivity of graphene composites is inversely proportional to temperature, but both are higher than those of pure copper matrix. When the included angle between the orientation of graphene arrangement and the direction of heat flow is between $0^{\circ}\sim 8.19^{\circ}$, the thermal conductivity of the composite can be effectively improved. The thermal conductivity of the composite is increased with the increase of graphene dimension and number of layers and, when the doping arrangement angle is 0° and the dimension of 5 layers of graphene is $378.84\text{ \AA}$, the thermal conductivity improvement of the composite is remarkable, which is 72.7% higher than that of the pure copper model. This paper can provide theoretical guidance

收稿日期: 2025-12-03; 修回日期: 2026-02-25

基金项目: 北京市自然科学基金(3232053); 国家自然科学基金项目(51929701, 52207153, 92266109)。

Project Supported by Beijing Natural Science Foundation(3232053), National Natural Science Foundation of China(51929701, 52207153, 92266109).

and technical support for the optimal design of high-performance copper-based composites in engineering.

Key words: circuit breaker contacts; thermal conductivity; graphene; molecular dynamics simulation

0 引言

为实现国家“双碳”战略目标^[1-4], 新能源电力系统面临更高效清洁能源利用^[5-8]、更大规模化可再生能源互连互通等转型需求^[9-13], 输电装备亟需向更高电压等级、大容量化方向发展。高压断路器作为能源输送装备中的“网络关节”和“安全守卫”, 其稳定可靠运行对构建安全、经济、灵活的新能源电力系统意义重大^[14-15]。

高压断路器具有线路设备投入退出控制、短路保护、过载保护等多重功能, 铜基电触头材料因其导电性强、机械强度高优点被广泛地用于高压断路器中。但面对逐渐升高的电压等级、日渐频繁的设备投切, 铜基触头材料的抗烧蚀性能受到了严峻的挑战。尤其是断路器触头开断过程中, 高能电弧产生的热量迅速积聚在触头表面, 造成了触头材料的熔化、蒸发与喷溅, 加剧了对触头的烧蚀破坏, 极易引发铜基触头失效从而造成安全事故^[16-18]。因此, 从优化断路器电触头导热性能的角度出发, 以降低电弧高温侵蚀作用对触头表面损伤的影响, 设计具备高热导率的铜基复合材料对提升触头抗烧蚀性能具有重要意义。

为了延长触头使用寿命, 减小电弧烧蚀对触头材料的损害, 众多学者进行了大量研究。许潘^[19]等人建立了同时考虑电极熔化和熔池流动的烧蚀模型, 分析了电弧热流密度等因素对触头表面温升等的影响。刘冰^[20]等人采用超音速微粒轰击法在 CuW 复合材料表面制备纳米层, 研究发现表面纳米化提高了复合材料耐电弧侵蚀性能。但目前多是针对放电烧蚀的仿真研究与提高抗烧蚀性能的实验制备, 鲜见从导热角度来提升触头抗烧蚀性能的作用机制探究。

石墨烯(graphene, Gp)作为目前导电导热性最好、强度最高的纳米材料, 被广泛作为增强相应用于制备高热导复合材料中^[21]。Goli 等人^[22]使用化学气相沉积法制备了石墨烯—铜复合材料, 并发现掺杂石墨烯可以有效提高材料热导率。通过实验方法研究复合材料的微观结构变化成本较高且易受到环境、设备等多种外界因素的干扰, 而随着计算机科学和仿真技术的不断进步, 分子动力学(molecular dynamics, MD)方法能够从微观角度低成本、高精度地揭示实验中的机理与规律^[23]。

Zhang^[24]等人通过分子模拟方法研究了热导率和分子结构特征间的基本关系。毛亦尘^[25]等人采用 MD 方法对硅晶体热导率的影响因素揭示了材料中点缺陷等因素的微观影响机制。因此, 采用分子动力学模拟方法来探究石墨烯掺杂对铜基复合材料热导率的影响而实现设计更高抗烧蚀性能触头材料的目标是一种行之有效的手段。

文中基于 LAMMPS 构建了铜及石墨烯改性铜复合材料的分子模型, 获得了温度、石墨烯排列取向、石墨烯尺寸、石墨烯层数对铜基复合材料热导率的影响规律, 并从微观角度解释了石墨烯对铜基复合材料导热增强的关联机制, 优化设计了更高抗烧蚀性能的铜基复合材料并通过实验进行了验证。研究结果对于进一步设计高热导高抗烧蚀性能的铜基电触头复合材料具有指导价值。

1 模型构建与仿真设置

1.1 分子模型构建

铜基电触头因其优异的力学、耐磨和耐腐蚀等性能被广泛运用于低压断路器、低频断路器、真空断路器等多种断路器中^[26]。因此, 文中构建了 Cu 基体及不同石墨烯结构改性的 Gp/Cu 复合模型, Cu 的晶格结构为面心立方(face-centered cubic, FCC), 其晶格常数为 3.61 Å, 石墨烯是由单层六边形蜂窝结构的碳原子所构成的二维材料, x 方向最小单元的晶格长度为 2.46 Å, y 方向最小单元的晶格长度为 4.26 Å, 为了满足周期性边界条件的要求, 需要设定合适的模型边长以保证各边长均为其最小单元晶格长度的整数倍, 综合考虑模型计算效率, 通过计算, 构建边长分别为 379.05、46.93、379.05 Å 的 Cu 基体, 共 573 300 个铜原子。构建 378.84 Å×46.86 Å 的单层石墨烯, 厚度为 1.42 Å, 共 6 776 个碳原子, 删去以 $Z=189.525$ Å 为中心的一行 Cu 原子并将石墨烯嵌入 Cu 基体中, 得到与 x 轴夹角 0° 的单层石墨烯/铜模型, 见图 1; 在此基础上, 构建与 x 轴夹角分别为 15°、30°、45°、60°、75°、90° 的单层石墨烯模型, 将其嵌入 Cu 基体中, 见图 2, 用以探究石墨烯排列取向对复合材料热导率的影响; 探究石墨烯尺寸对复合材料热导率的影响时, 构建 95.49 Å×46.86 Å、199.42 Å×46.86 Å、290.28 Å×46.86 Å 的单层石墨烯, 分别嵌入 Cu 基体中, 复合模型的局部示意图见图 3; 为探究石墨烯层数对复合材料热导率的影响, 分别构建 2、3、

4、5层的石墨烯,去除 Cu 基体中对应层数的 Cu 原子后将石墨烯嵌入,所得模型见图 4。

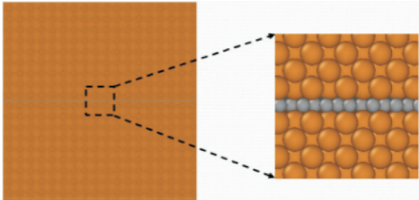


图 1 单层 Gp/Cu 模型

Fig. 1 Single-layer Gp/Cu model

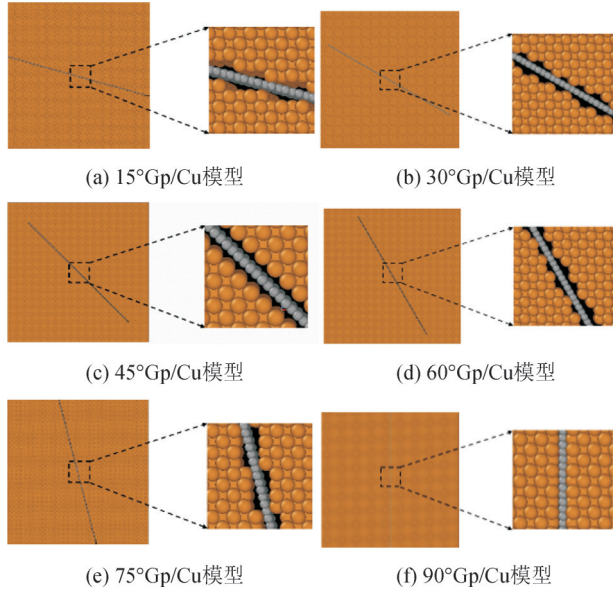


图 2 石墨烯不同排列取向分布模型图

Fig. 2 Model diagram of graphene with different arrangement and orientation distribution

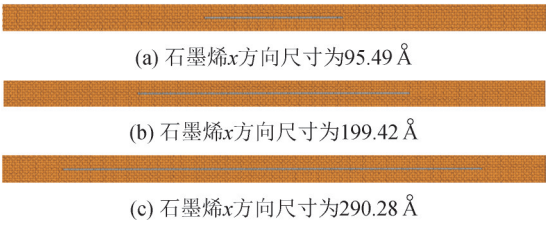


图 3 不同石墨烯尺寸的复合模型

Fig. 3 Composite models of different graphene sizes

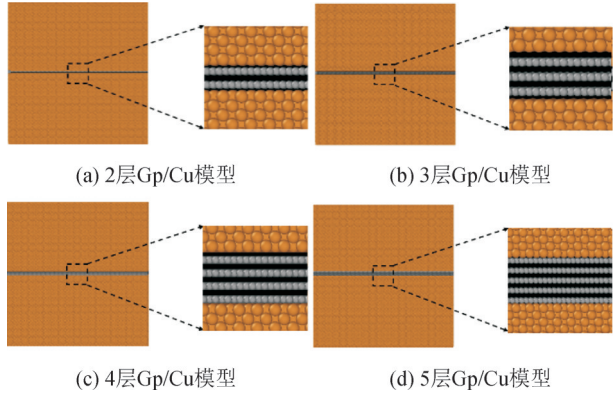


图 4 不同石墨烯层数的复合模型

Fig. 4 Composite models of different graphene layers

1.2 势函数设置

分子动力学基于经典牛顿力学原理,对整个系统的原子/分子运动状态进行模拟,其最小单位为一个原子,每个原子所受作用主要分为化学键作用和非键作用,这些作用都通过势函数(能量函数)来进行描述。

金属 Cu 原子之间采用嵌入原子势(embedded atom method, EAM)^[27],该势函数能很好地描述金属结合能的形成,对于有 N 个电子的体系,体系总能量表示为

$$E = \sum_{i=1}^N G_i(\rho_{h,i}) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N \phi_{ij}(\rho_{ij}) \tag{1}$$

式(1)中: G_i 为嵌入能,表示将原子 i 嵌入电子密度 ρ_i 的能量; ρ_i 为其他近邻原子在 i 处产生的电荷密度; ϕ_{ij} 为原子 i 与 j 之间的斥能,其计算公式分别为:

$$\rho_{h,i} = \sum_{j=1, j \neq i}^N \rho_j(R_{ij}) \tag{2}$$

$$\phi_{ij}(R_{ij}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z(i)Z(j)}{R_{ij}} \tag{3}$$

石墨烯中的 C 原子与金属 Cu 原子之间采用 L-J^[28] 势函数,其表达式为

$$E = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad \bar{r} < r_c \tag{4}$$

式(4)中: ϵ 为势阱深度, $\epsilon_{(\text{Cu}-\text{C})} = 0.0117 \text{ eV}$; σ 为相互作用势能等于 0 时两原子间的距离, $\sigma_{\text{Cu}-\text{C}} = 3.0023 \text{ \AA}$; r_c 为势函数的截断距离, $r_c = 2.5\sigma_{(\text{Cu}-\text{C})}$ 。

石墨烯中的 C-C 原子之间使用 AIREBO 势函数^[29]。能量可用共价键相互作用(REBO)、长程相互作用(LJ)与扭转相互作用之和表示

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \left[E_{ij}^{\text{REBO}} + E_{ij}^{\text{LJ}} + \sum_{k \neq i, j, l \neq i, j, k} E_{ijkl}^{\text{tors}} \right] \tag{5}$$

式(5)中: E_{ij}^{REBO} 为原子 i 与 j 之间的共价键相互作用; E_{ij}^{LJ} 为采用 LJ 形式来表示色散与分子间相互作用; E_{ijkl}^{tors} 为依赖于二面角的扭转相互作用。

1.3 区域设置与热导率计算

首先在 LAMMPS 中对模型进行几何结构优化,删除重叠原子并调整位置。对体系温度进行初始化,使用共轭梯度算法对模型进行能量最小化,其收敛标准设置为 $1.0 \times 10^{-8} \text{ eV}$ 。之后以 1 fs 的时间间隔,在相应温度下进行 20 000 步的等温等压(NPT)弛豫,接着将模型在等温等体(NVT)系综下以 1 fs 的时间间隔弛豫 20 000 步达到平衡。

热导率作为材料重要的热物性参数,其数值可有效评价材料导热性能的优良^[30]。在分子动力学模

拟中计算晶格热导率最常用的方法是平衡分子动力学(equilibrium molecular dynamic, EMD)模拟和非平衡分子动力学模拟(non-equilibrium molecular dynamic, NEMD)。NEMD的收敛性与计算速度要优于EMD模拟,且更适用于研究不同长度尺度的热导率计算,因此文中采用基于傅里叶定律的非平衡分子动力学(NEMD)模拟。傅里叶导热定律的表达式为

$$q = -\kappa \nabla T$$
 (6)

式(6)中: ∇T 为温度梯度; q 为热流密度; κ 为导热系数;负号为热流从高温的区域流到低温的区域。

由式(6)可知,施加温度,获得温度梯度及热流即可求出热导率。常见的控温方法有 Langevin 控温法、Nosé-Hoover 热浴法、temp/rescale 速度标定法等。Langevin 恒温器因其随机性和局部性,配合微正则(NVE)系综使用能在温度梯度模拟中表现出较为优异的性能。在获得温度梯度时,需沿传热方向把模型划分为若干等份,分别计算每一份内原子的平均温度,设置块数较少时,无法观测模型空间上的细节;当分块较多时,原子个体差异会引起误差,导致温度梯度上下波动。多次模拟后发现将模型分为100块时温度梯度及热流分布都较为平衡,模拟效果较好。

考虑模型固定问题,在模型两端设置厚度为 7.58 Å 的固定层,可有效防止体系内原子越界。在固定层内侧设置厚度为 3.79 Å 的“热源”和“冷源”,其模型区域划分见图 5。

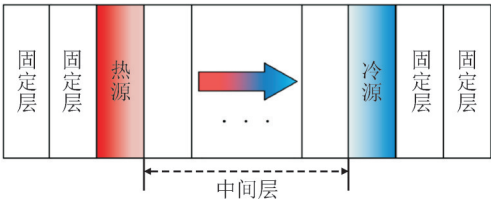


图5 模型区域划分示意图

Fig. 5 Schematic diagram of model area division

因此,将模型沿 x 轴方向等分为 100 块,并将传热方向改为固定边界条件,使用 Langevin 法使“热源”和“冷源”保持在所需温度,保存温差和热源、冷源中输入、输出的能量,用于计算热流密度,进而求得热导率。

2 仿真结果分析与讨论

2.1 模型合理性验证

为保证复合材料仿真模拟的正确性,首先对 Cu 模型设置的合理性进行验证。基于 LAMMPS 分子模拟软件,在 300 K 温度下,弛豫时间为 40 ps,总模拟时间为 100 ps。每 10 ps 输出温度、能量、原子坐标等数据,后续通过 python 脚本得到热流图及温度

梯度图,见图 6、7。其中,在“热源”与“冷源”附近温度出现温度跳跃,这是由于“源”的直接添加使区域出现非线性部分,但在计算时应考虑此部分而非只考虑中间线性部分以得到温度梯度^[31],由此计算得到温度梯度 $\nabla T = -0.259 \text{ K/Å}$,热流密度 $q = 4.528 \times 10^{10} \text{ W/m}^2$,根据式(6)计算得到 Cu 的晶格热导率为 17.48 W/mK 。接着对 300 ~ 1 200 K 的 Cu 基体进行 NEMD 模拟,得到的数值及趋势均与文[32]一致,结果见图 8。由此可验证本模拟体系的合理性。

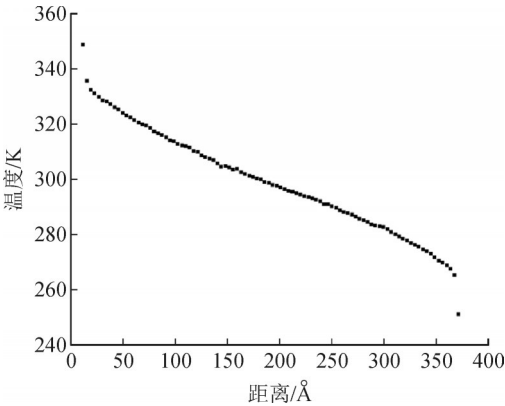


图6 温度梯度图(Cu)

Fig. 6 Temperature gradient plot(Cu)

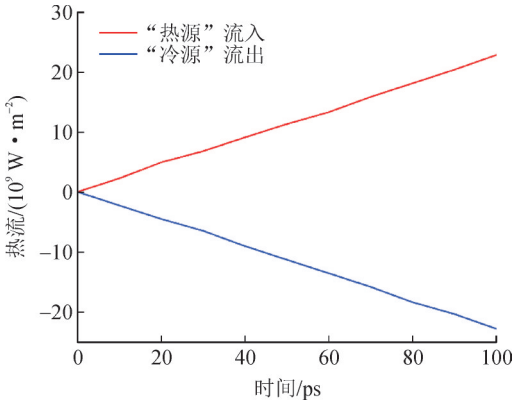


图7 热流示意图(Cu)

Fig. 7 Heat flow diagram(Cu)

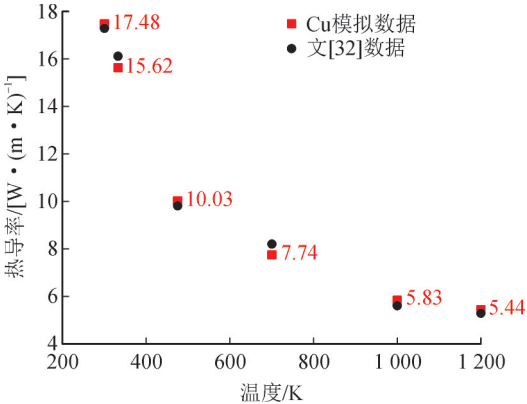


图8 Cu热导率与文献对比图

Fig. 8 Comparison between Cu thermal conductivity and literature

2.2 温度对复合材料热导率的影响

首先探究温度对图1中模型热导率的影响,在LAMMPS进行模拟计算,设置模拟温度分别为100、200、300、400、500、600 K,弛豫时间为40 ps,总模拟时间为100 ps。通过python脚本得到温度梯度和热流值,进一步求得模型热导率随温度的变化趋势,并与不掺杂石墨烯的Cu基体进行对比,结果见图9。

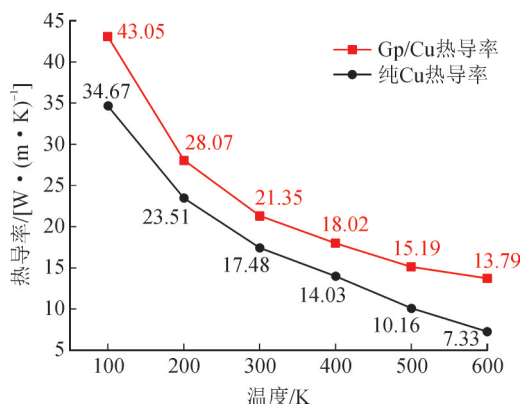


图9 复合材料热导率随温度变化规律

Fig. 9 The thermal conductivity of composite materials changes with temperature

由图9可知,温度处于100 K至600 K之间时,石墨烯掺杂铜复合材料的热导率与温度成反比,变化率逐渐减小,均高于同等温度下未掺杂的纯Cu模型。

固体材料内部晶格振动引起热能传递,其振动具有波的形式,能级是量子化的,用声子表示格波的量子^[33],固体的声子热导率表达式为

$$\kappa = \frac{1}{3} C_v v l \quad (7)$$

由式(7)可知,影响声子热导率的因素有材料的热容 C_v 、声子的平均速度 v 和表征声子碰撞频率大小的声子平均自由程 l ,而影响材料热导率的主要因素是声子的平均自由程 l ^[34]。当温度升高时,复合材料内部声子振动幅度增大,频率变高,引起声子的倒逆过程(umklapp process)增强,从而使声子平均自由程减小^[35],因此复合材料热导率随温度升高而减小。300 K时石墨烯改性铜复合材料的热导率比未掺杂时提高约22.1%,这是由于石墨烯中碳碳之间的共价键强且碳原子质量小,掺杂后提高了复合材料的声速及声子平均自由程,从而提高了复合材料的热导率,这表明在铜基电触头材料中采用石墨烯改性能提高其热导率。

2.3 石墨烯排列取向对复合材料热导率的影响

将石墨烯排列取向不同的复合模型导入LAMMPS中,在300 K下弛豫40 ps,总模拟时间为

100 ps,求得复合材料热导率随石墨烯排列取向的变化规律,见图10。

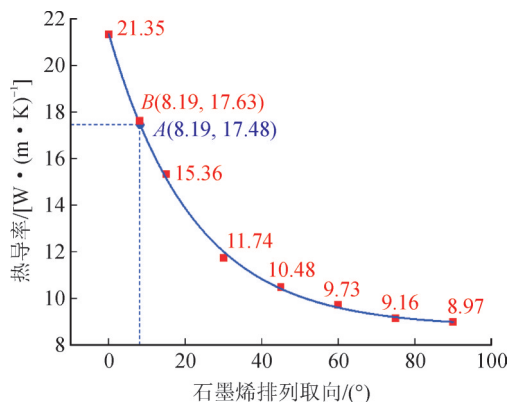


图10 复合材料热导率随石墨烯排列取向变化规律

Fig. 10 The thermal conductivity of the composite changes with the orientation of the graphene arrangement

由图10可观察到,复合材料热导率随石墨烯与热流方向角度的增加而逐渐减小,这是由于石墨烯作为二维纳米材料具有各向异性,故其平面内方向比平面外方向的导热系数大1~2个数量级^[36],造成沿热流方向石墨烯能有效导热但垂直热流方向上无有效的导热通道,热量在Gp层和Cu层上交替流动过程中会产生大量的界面热阻,大大降低材料的热导率,最终导致复合材料热导率变小。且角度越大,石墨烯在热流方向上的投影就越短,沿着石墨烯平面内方向运输的热量就越少,因此最终结果表现为复合材料热导率随石墨烯角度增加而减小的趋势。

由图9可知,300 K时纯Cu基体的晶格热导率为17.48 W/(m·K),对不同排列取向Gp/Cu复合模型热导率数据进行拟合,如图10中蓝色曲线所示。当复合模型热导率与纯Cu热导率相等时,石墨烯排列取向为8.19°,如点A所示。为验证拟合数据的正确性,构建石墨烯与热流角度为8.19°的Gp/Cu模型,并在300 K温度下进行模拟计算,得到其热导率为17.63 W/(m·K),与拟合数据误差小于1%。综上所述可知,掺杂石墨烯排列取向与热流方向夹角处于0°~8.19°之间时,可提升铜基电触头材料的热导率。

2.4 石墨烯尺寸对复合材料热导率的影响

对图3中的含不同尺寸石墨烯的复合模型进行模拟计算,设置温度为300 K,弛豫时间为40 ps,总模拟时间为100 ps。在python中对数据进行处理,得到温度梯度和热流值,进而得到热导率与石墨烯尺寸的关系,见图11。

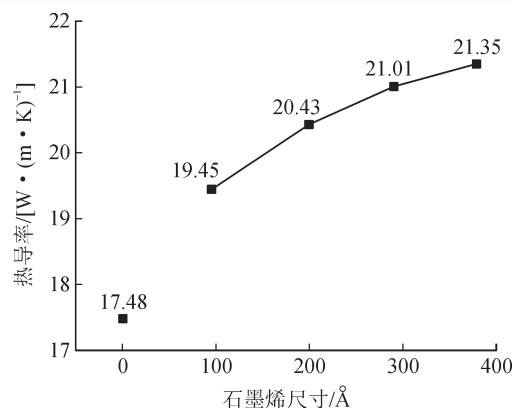


图 11 复合模型热导率随石墨烯尺寸变化规律

Fig. 11 The thermal conductivity of the composite model varies with the size of grapheme

由图 11 可知,当石墨烯长度处于0~378 Å范围内时,复合材料热导率随石墨烯尺寸的增大而增大。这是由于当热流方向石墨烯尺寸小于其声子平均自由程时,其面内热输运主要为弹道输运,此时面内存在界面散射导致声子平均自由程减小,随石墨烯尺寸逐渐增大,界面散射减小,其声子平均自由程将逐渐增大,引起石墨烯热导率增大^[37],进而复合材料热导率也随之增加。

2.5 石墨烯层数对复合材料热导率的影响

对图 4 中的含不同层数石墨烯的复合模型在 300 K 温度下进行模拟计算,总弛豫时间为 40 ps,总模拟时间为 100 ps。对数据进行处理,得到温度梯度和热流值,进而得到热导率与石墨烯层数的关系,见图 12。

从图 12 可以看出,复合材料热导率随石墨烯层数的增加而上升,且上升速率较快。有研究表明,

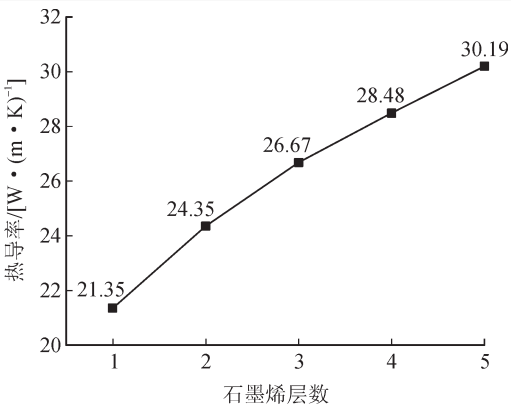


图 12 复合模型热导率随石墨烯层数变化规律

Fig. 12 The thermal conductivity of the composite model changes with the number of graphene layers

当热流沿石墨烯平面流过时,复合材料体系的界面热导随石墨烯层数增加而变大^[38],这是因为随石墨烯层数的增多,界面内单位面积的碳原子数目变大,石墨烯与铜之间相互作用增强,能量损失减小,声子热输运效果更好,使得其界面热导变大,从而影响复合材料总热导率,表现为石墨烯掺杂铜复合材料的热导率随石墨烯层数的增多而增大。

为了更好地观测复合材料内部温度变化,对添加单层石墨烯、5 层石墨烯的模型进行数据后处理,在 Ovito 中每 20 ps 输出模型原子温度,得到温度云图,见图 13。结果表明,随时间的变化,左侧原子温度不断升高,右侧原子温度逐渐减低,说明热流沿 x 轴方向从左向右传输,对比单层石墨烯和 5 层石墨烯模型的原子温度可知,随层数的增多,高温区域更明显,热流传输值也越大,这与复合材料热导率与石墨烯层数成正比的结论是一致的。

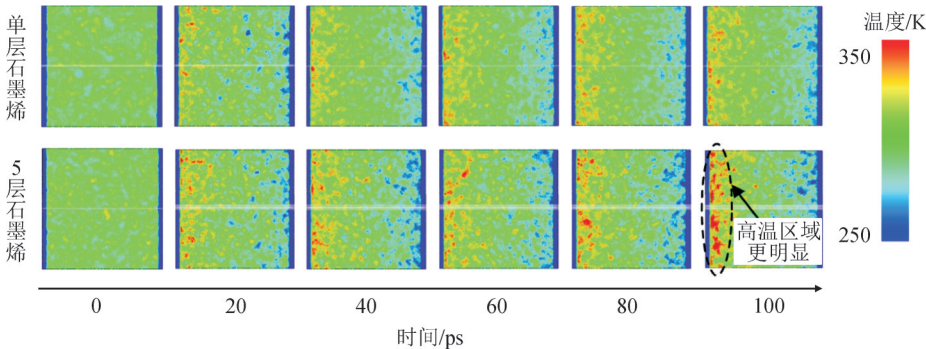


图 13 掺杂单层石墨烯与 5 层石墨烯复合模型的温度云图

Fig. 13 Temperature cloud of a composite model doped with single-layer graphene and five-layer graphene

综上可知,在温度为 300 K 时,掺杂排列角度为 0°、尺寸为 378.84 Å 的 5 层石墨烯时,复合材料的热导率提升最为显著,较纯铜模型提高了 72.7%,这可为设计具备更高抗烧蚀性能的石墨烯改性铜基电触头材料提供一定的理论参考。

3 石墨烯增强铜基复合材料抗烧蚀性能实验

为了验证仿真结果的准确性,对 Cu 及 Gp/Cu 复合材料进行了抗烧蚀性能实验。试验样品由合作单位提供,其中石墨烯质量分数为 0.2%,与仿真模

型质量分数相同。电弧烧蚀电路图见图 14,实验平台主要由充电回路、储能电容、烧蚀电极、测量回路组成,分别使用 Cu 和 Gp/Cu 复合材料作为烧蚀电极进行实验。将储能电容充电至 4 kV,断开充电回路,发出触发信号使气隙开关闭合,电极间产生电弧放电,重复上述过程并记录 Gp/Cu 复合材料与 Cu 烧蚀 10、20、35 次的质量损失,取 3 组样品试验 3 次,取平均值,石墨烯增强铜基复合材料抗烧蚀性能实验的结果见图 15。由图 15 可知,烧蚀 10 次后掺杂了 0.2% 石墨烯的 Gp/Cu 复合材料较未掺杂的 Cu 单质烧蚀量减少了 66.7%,20 次烧蚀量减少了 42.1%,35 次后烧蚀量减少了 32.3%,可见掺杂石墨烯后,能够有效提高铜基复合材料的抗烧蚀性能,这是由于石墨烯增强了复合材料的热导率,使得热流能够更迅速的从材料表面传递至基体深处,减少了表面 Cu 原子的蒸发飞溅。

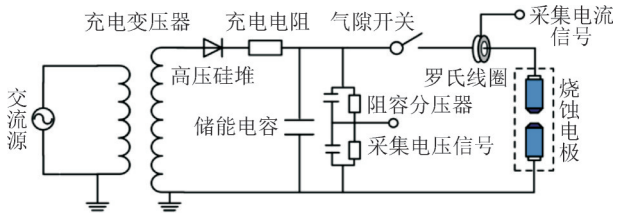


图 14 电弧烧蚀实验电路图

Fig. 14 Circuit diagram of arc ablation experiment

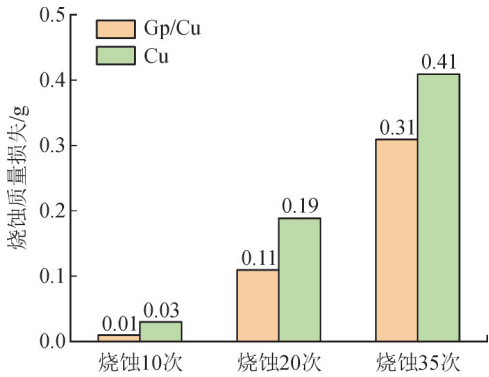


图 15 Gp/Cu 与 Cu 的烧蚀质量损失

Fig. 15 Erosion mass loss of Gp/Cu and Cu

4 结论

文中通过 LAMMPS 分子模拟,厘清了温度、石墨烯排列取向、石墨烯尺寸、石墨烯层数对复合材料热导率的影响规律,从微观层面分析了石墨烯对复合材料热输运特性的增强机制,提出了更高抗烧蚀性能铜基复合材料的优化设计并通过实验进行了验证。得到以下结论:

1)Gp/Cu 复合模型的热导率与温度成反比,主要原因是随温度升高复合模型声子平均自由程逐渐减小,但均高于纯 Cu 模型热导率,300 K 时石墨烯

改性铜复合材料的热导率比未掺杂时提高约 22.1%;随石墨烯尺寸增大,界面散射逐渐减小导致声子平均自由程增大,引起石墨烯热导率增大,进而复合材料热导率也随之增加。

2)当石墨烯排列取向与热流方向夹角处于 0°~8.19°之间时可有效提高复合材料热导率,其它取向角度下因界面热阻增大使复合材料热导率低于纯 Cu 基体的热导率;随石墨烯层数的增多,石墨烯与铜之间相互作用增强使其界面热导变大,从而使复合材料的热导率增大。

3)掺杂排列取向为 0°、尺寸为 378.84 Å 的 5 层石墨烯后,铜基复合材料热导率较纯 Cu 模型提高了 72.7%,实验证明掺杂石墨烯后能有效提高复合材料的抗烧蚀性能,延长触头寿命,为工程上设计更高抗烧蚀性能的铜基电触头材料提供了理论依据。

参考文献:

[1] 袁昊,刘宇航,孙洁,等.“双碳”背景下新能源并网储能容量优化配置方法[J]. 电网与清洁能源,2024,40(9):134-140.
Yuan Hao, Liu Yuhang, Sun Jie, et al. Energy storage capacity optimization allocation methods for grid-connected new energy under dual-carbon background[J]. Power System and Clean Energy, 2024,40(9):134-140.

[2] 游铭豪,顾洁,储琳琳,等.“双碳”背景下结合系统动力学和弹性网络回归的区域电力需求中长期预测方法[J]. 供用电,2024,41(7):72-83.
You Minghao, Gu Jie, Chu Linlin, et al. A mid-long regional electricity demand forecasting method based on system dynamics and elastic network regression under dual carbon targets[J]. Distribution & Utilization, 2024,41(7):72-83.

[3] 崔茗莉,冯天天,刘利利.双碳目标下区块链与可再生能源的融合发展研究[J]. 智慧电力,2024,52(2):17-24.
Cui Mingli, Feng Tiantian, Liu Lili. Integration and development of blockchain and renewable energy under double carbon target[J]. Smart Power, 2024,52(2):17-24.

[4] 吴应双,刘蔚,刘明顺,等.规模化新能源接入电网下的多区域协同算法[J]. 南方电网技术,2025,19(9):172-186.
Wu Yingshuang, Liu Wei, Liu Mingshun, et al. Multi-area cooperative algorithm under large-scale new energy access to power grid[J]. Southern Power System Technology, 2025,19(9):172-186.

[5] 左剑,钟雅珊,包博,等.考虑新能源不确定性的电网运行调度多目标优化模型[J]. 电网与清洁能源,2025,41(3):152-158.
Zuo Jian, Zhong Yashan, Bao Bo, et al. A multi-objective optimization model of power grid operation and dispatching considering uncertainty of new energy[J]. Power System and Clean Energy, 2025,41(3):152-158.

[6] 许琴,刘一鸣,陈志刚,等.负荷水平约束条件下新能源出力场景生成新方法[J]. 南方电网技术,2025,19(1):51-62.
Xu Qin, Liu Yiming, Chen Zhigang, et al. A new method for generating new energy output scenarios with load level constraints

- [J]. Southern Power System Technology, 2025, 19(1): 51-62.
- [7] 汪楠楠, 卢宇, 唐浩, 等. 应用于新能源孤岛经柔直送出系统的交流耗能优化投切策略[J]. 电力建设, 2024, 45(12): 187-194.
Wang Nannan, Lu Yu, Tang Hao, et al. Improved switching strategies of AC energy consumption devices for VSC - HVDC system with renewable energy integration in island mode[J]. Electric Power Construction, 2024, 45(12): 187-194.
- [8] 张秀琦, 刘鸿清, 王立强, 等. 基于Koopman算子的新能源高占比电网暂态电压失稳识别方法[J]. 电力科学与技术学报, 2025, 40(2): 10-20.
Zhang Xiuqi, Liu Hongqing, Wang Liqiang, et al. Transient voltage instability identification based on Koopman operator in power grid with a high proportion of renewables[J]. Journal of Electric Power Science and Technology, 2025, 40(2): 10-20.
- [9] 沈赋, 曹畅, 徐潇源, 等. 高比例可再生能源电力系统惯量预测方法研究综述[J]. 电力建设, 2025, 46(8): 116-128.
Shen Fu, Cao Yang, Xu Xiaoyuan, et al. A review of inertia prediction methods for power system with high penetration renewable energy sources[J]. Electric Power Construction, 2025, 46(8): 116-128.
- [10] 张鹏辉, 肖东亮, 华栋, 等. 高比例可再生能源电力系统的动态频率安全约束机组组合[J]. 供用电, 2025, 42(2): 90-99.
Zhang Penghui, Xiao Dongliang, Hua Dong, et al. Dynamic frequency security constraints unit commitment for high shares of renewables power systems[J]. Distribution & Utilization, 2025, 42(2): 90-99.
- [11] 方必武, 展展滔, 王科, 等. 考虑储能荷电越限的高比例可再生能源系统的源荷储协调优化[J]. 供用电, 2024, 41(7): 92-98.
Fang Biwu, Fan Zhantao, Wang Ke, et al. Coordinated optimization of source-load-storage for a high-proportion renewable energy system considering the overcharge of energy storage[J]. Distribution & Utilization, 2024, 41(7): 92-98.
- [12] 和萍, 刘鑫, 宫智杰, 等. 高比例可再生能源电力系统源荷储联合调峰分层优化运行[J]. 电力系统保护与控制, 2024, 52(18): 112-122.
He Ping, Liu Xin, Gong Zhijie, et al. Hierarchical optimization operation model for joint peak-load regulation of source-load-storage in a high proportion of renewable energy power system[J]. Power System Protection and Control, 2024, 52(18): 112-122.
- [13] 赵浩然, 张卓文, 杨震, 等. 数字中国与碳中和战略下数字经济对可再生能源发展的影响研究[J]. 智慧电力, 2025, 53(8): 54-61.
Zhao Haoran, Zhang Zhuowen, Yang Zhen, et al. Research on impact of digital economy on renewable energy development under digital china and carbon neutrality strategy[J]. Smart Power, 2025, 53(8): 54-61.
- [14] 李庆民, 于万水, 赵继尧. 支撑“双碳”目标的风光发电装备安全运行关键技术[J]. 高电压技术, 2021, 47(9): 3047-3060.
Li Qingmin, Yu Wanshui, Zhao Jiyao. Key technologies for the safe operation of wind and solar power generation equipment in support of the “peak CO₂ emissions and carbon neutrality” policy[J]. High Voltage Engineering, 2021, 47(9): 3047-3060.
- [15] 裴瑶, 武建文, 马速良, 等. 基于多特征评估与XGBoost的高压断路器故障诊断[J]. 高压电器, 2023, 59(4): 1-9.
Chang Yao, Wu Jianwen, Ma Suliang, et al. Fault diagnosis of high voltage circuit breaker based on multi-feature assessment and XGBoost[J]. High Voltage Apparatus, 2023, 59(4): 1-9.
- [16] 范敏, 陈功, 蓝磊, 等. SF₆断路器弧触头电烧蚀试验及状态诊断[J]. 高压电器, 2016, 52(6): 141-146.
Fan Min, Chen Gong, Lan Lei, et al. Electrical erosion experiment and state diagnosis on arcing contact of SF₆ circuit breaker[J]. High Voltage Apparatus, 2016, 52(6): 141-146.
- [17] 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.
- [18] 伍玉鑫, 王佳琳, 周雄, 等. SF₆断路器灭弧室内短路电流开断过程仿真研究[J]. 广东电力, 2022, 35(11): 72-80.
Wu Yuxin, Wang Jialin, Zhou Xiong, et al. Simulation study on interruption process of short-circuit current in SF₆ circuit breaker chamber[J]. Guangdong Electric Power, 2022, 35(11): 72-80.
- [19] 许潘, 杨泽锋, 魏文赋, 等. 降弓电弧对接线线侵蚀的仿真研究[J]. 高电压技术, 2019, 45(11): 3529-3538.
Xu Pan, Yang Zefeng, Wei Wenfu, et al. Simulation research of contact wire erosion under lowering pantograph arc[J]. High Voltage Engineering, 2019, 45(11): 3529-3538.
- [20] 刘冰, 陈文革, 张志军. 钨铜合金表面纳米化及其性能分析[J]. 稀有金属材料与工程, 2015, 44(12): 3188-3191.
Liu Bing, Chen Wenge, Zhang Zhijun. Tungsten-copper alloy surface nano-crystallization and its properties[J]. Rare Metal Materials and Engineering, 2015, 44(12): 3188-3191.
- [21] 丁一, 祝志祥, 韩钰. 新型石墨烯增强铜基复合电触头材料研发进展[J]. 新材料产业, 2018(11): 38-41.
Ding Yi, Zhu Zhixiang, Han Yu. Research and development progress of new graphene-reinforced copper-based composite electrical contact materials[J]. Advanced Materials Industry, 2018(11): 38-41.
- [22] Goli P, Ning Hao, Li Xuesong, et al. Thermal properties of graphene-copper-graphene heterogeneous films[J]. Nano Letters, 2014, 14(3): 1497-1503.
- [23] 李庆民, 黄旭炜, 刘涛, 等. 分子模拟技术在高电压绝缘领域的应用进展[J]. 电工技术学报, 2016, 31(12): 1-13.
Li Qingmin, Huang Xuwei, Liu Tao, et al. Application progresses of molecular simulation methodology in the area of high voltage insulation[J]. Transactions of China Electrotechnical Society, 2016, 31(12): 1-13.
- [24] Zhang T, Wu X, Luo T. Polymer nanofibers with outstanding thermal conductivity and thermal stability: fundamental linkage between molecular characteristics and macroscopic thermal properties[J]. The Journal of Physical Chemistry C, 2014, 118(36): 21148-21159.
- [25] 毛亦尘, 熊扬恒, 岳亚楠. 硅晶体热导率及点缺陷散射影响的分子动力学模拟[J]. 哈尔滨工业大学学报, 2019, 51(7): 112-120.
Mao Yichen, Xiong Yangheng, Yue Yanan. Thermal conductivity

- of silicon crystal and effects of point defect scatter by molecular dynamics[J]. Journal of Harbin Institute of Technology, 2019, 51(7):112-120.
- [26] 王瑞娟,王俊勃,宋宇宽,等. 高压和真空铜基触头材料的研究进展[J]. 电工材料,2014(4):15-18.
Wang Ruijuan, Wang Junbo, Song Yukuan, et al. Research and development of high-voltage and vacuum copper based contact materials[J]. Electrical Engineering Materials, 2014(4):15-18.
- [27] Zhou X W, Johnson R A, Wadley H N G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers[J]. Physical Review B, 2004, 69(14):144113.
- [28] Huang Hai, Tang Xiaobin, Chen Feida, et al. Radiation damage resistance and interface stability of copper-graphene nanolayered composite[J]. Journal of Nuclear Materials, 2015(460):16-22.
- [29] Stuart S J, Tutein A B, Harrison J A. A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions[J]. The Journal of Chemical Physics, 2000, 112(14):6472-6486.
- [30] 陈贞睿,刘超,谢炎崇,等. 高导热金属基复合材料的制备与研究进展[J]. 粉末冶金技术, 2022, 40(1):40-52.
Chen Zhenrui, Liu Chao, Xie Yanchong, et al. Preparation and research process of high thermal conductivity metal matrix composites[J]. Powder Metallurgy Technology, 2022, 40(1):40-52.
- [31] Li Zhen, Xiong Shiyun, Sievers C, et al. Influence of thermostatting on nonequilibrium molecular dynamics simulations of heat conduction in solids[J]. The Journal of Chemical Physics, 2019, 151(23):234105.
- [32] Feng Bo, Li Zhixin, Zhang Xing. Role of phonon in the thermal and electrical transports in metallic nanofilms[J]. Journal of Applied Physics, 2009(105), 104315
- [33] 黄昆. 固体物理学[M]. 北京:北京大学出版社, 2009.
Huang Kun. Solid state physics[M]. Beijing: Peking University Press, 2009.
- [34] 惠治鑫,贺鹏飞,戴瑛,等. 硅功能化石墨烯热导率的分子动力学模拟[J]. 物理学报, 2014(7):1.
Hui Zhixin, He Pengfei, Dai Ying, et al. Molecular dynamics simulation of the thermal conductivity of silicon functionalized graphene[J]. Acta Physica Sinica, 2014(7):1.
- [35] 魏志勇,毕可东,陈云飞. 石墨烯纳米带热导率的分子动力学模拟[J]. 东南大学学报(自然科学版), 2010, 40(2):306-310.
Wei Zhiyong, Bi Kedong, Chen Yunfei. Thermal conductivity of graphene nanoribbons simulated by molecular dynamics[J]. Journal of Southeast University(Natural Science Edition), 2010, 40(2):306-310.
- [36] 刘丁孔. 铜基高导热复合材料的制备与性能研究[D]. 贵阳:贵州大学, 2020.
Liu Dingkong. Preparation and properties of copper-based high thermal conductivity composites[D]. Guiyang: Guizhou University, 2020.
- [37] 侯泉文,曹炳阳. 碳纳米管的热导率:从弹道到扩散输运[J]. 物理学报, 2009, 58(11):7809-7814.
Hou Quanwen, Cao Bingyang. Thermal conductivity of carbon nanotube: from ballistic to diffusive transport[J]. Acta Physica Sinica, 2009, 58(11):7809-7814.
- [38] 王建. 石墨烯/高分子复合材料界面导热性能的分子动力学模拟[D]. 太原:中北大学, 2016.
Wang Jian. Molecular dynamics simulation of the thermal conductivity of graphene/polymer composite interfaces[D]. Taiyuan: North University of China, 2016.
- 王梦溪(2000—),女,硕士研究生,主要从事断路器高性能触头材料设计方面的研究工作(E-mail:wmx_ncepu@163.com)。
- 李庆民(1968—),男,博士研究生,教授,博士生导师,主要从事高电压与绝缘技术、放电物理方面的研究工作(通信作者)(E-mail:lq-mee@nc_eptu.edu.cn)。