

多孔石墨烯渗氦仿真研究^{*}

张 晓, 刘招贤, 孟冬辉, 任国华, 王莉娜, 闫荣鑫

(北京卫星环境工程研究所, 北京 100094)

摘 要: 多孔石墨烯膜具有渗透率易于调节、稳定性好等特点, 可以实现可控纳米渗透元件来作为真空检漏中的标准漏孔材料。本文采用 MD 模拟进行单层多孔石墨烯渗氦仿真, 得到不同方向、大小、形状多孔石墨烯渗氦参数。仿真模拟表明: 各方向上石墨烯缺陷缺失碳环数和渗氦率近似可呈线性关系, 且各项斜率近似相等; 石墨烯缺陷缺失碳环数较少时, 不同形状石墨烯缺陷的渗氦率相近, 缺陷缺失碳环数较多时需通过对势垒降低的计算和模拟得到渗透增量, 进而利用小孔渗透率可以推算大孔渗透率。仿真结果表明多孔石墨烯作为标准漏孔渗透材料的可控性, 对渗透实验具有指导意义。

关 键 词: 石墨烯; 渗透; 分子动力学模拟; 膜

中图分类号: TB742; TN107

文献标识码: A

文章编号: 1002-0322(2021)01-0010-05

doi: 10.13385/j.cnki.vacuum.2021.01.03

Simulation Study on Porous Graphene Helium Permeation

ZHANG Xiao, LIU Zhao-xian, MENG Dong-hui, REN Guo-hua, WANG Li-na, YAN Rong-xin

(Beijing Institute of Spacecraft Environment Engineering, Beijing 100094, China)

Abstract: There are characteristics of easy adjustment of permeability and good stability for porous graphene membrane that can realize a controllable nano-permeable component as materials of standard leak in vacuum leak. In this paper, MD simulation is used to simulate the helium permeation of single-layer porous graphene, and the helium permeation parameters of porous graphene in different directions and different forms are obtained. The simulation result shows that the number of defective carbon rings and the helium permeation rate of graphene defects can be approximately linear along the zigzag direction and the diagonal direction, and the slopes are approximately equal. The helium permeation rate of graphene with different graphene shapes is similar when the number of missing carbon rings in monolayer porous graphene is small, and the permeation increment is obtained by calculating and simulating the barrier reduction when the number of missing carbon rings is large. This conclusion proves the controllability of porous graphene as materials of standard leak, which has guiding significance for permeation experiments.

Key words: graphene; penetration; molecular dynamics simulation; membrane

泄漏检测是真空技术的重要组成部分, 是航天产品测试的重要环节, 随着航天器件气密性的不断提高, 对检漏指标的要求也不断提高, 我们急需研究新型高性能超灵敏度氦质谱检漏技术^[1]。在超灵敏度真空检漏系统中, 为测量产品的准确漏率需要提供一个极小漏率的标准漏孔^[2], 本研究就是基于多孔石墨烯膜作为标准漏孔渗透材料, 利用其特性探究渗氦参数及其稳定可控性。

多孔石墨烯是具有人造缺陷的石墨烯(graphene), 继承石墨烯具有的良好力学、热学、

化学性能^[3-5], 具有很好的稳定性, 其性能是较为理想的标准漏孔渗透材料。石墨烯膜最薄只有一个分子层厚度, 层间距为 3.35Å, 任何气体和离子均无法透过完美石墨烯膜^[5-7], 而通过离子束辐射或氧化刻蚀等方法可以得到不同形状大小纳米孔^[8-10], 从而控制气体或液体选择渗透性, 因此在真空检漏、天然气分离等方面有很多应用需求和场景。

目前利用多孔石墨烯进行渗透率研究多在液体及气体选择透过方面, 且多模拟较小的模型

收稿日期: 2020-09-16

作者简介: 张晓(1996-), 男, 湖南株洲人, 硕士生。 通讯作者: 闫荣鑫, 研究员。

^{*} 基金项目: 国家自然科学基金航天先进制造联合基金(U1537109), 国防科工局技术基础计量课题(编号 JSJL2018203B016)。