

## 影响高浓度氧化石墨烯分散液流变行为的重要因素及群体平衡动力学分析

毛赫南, 王晓工\*

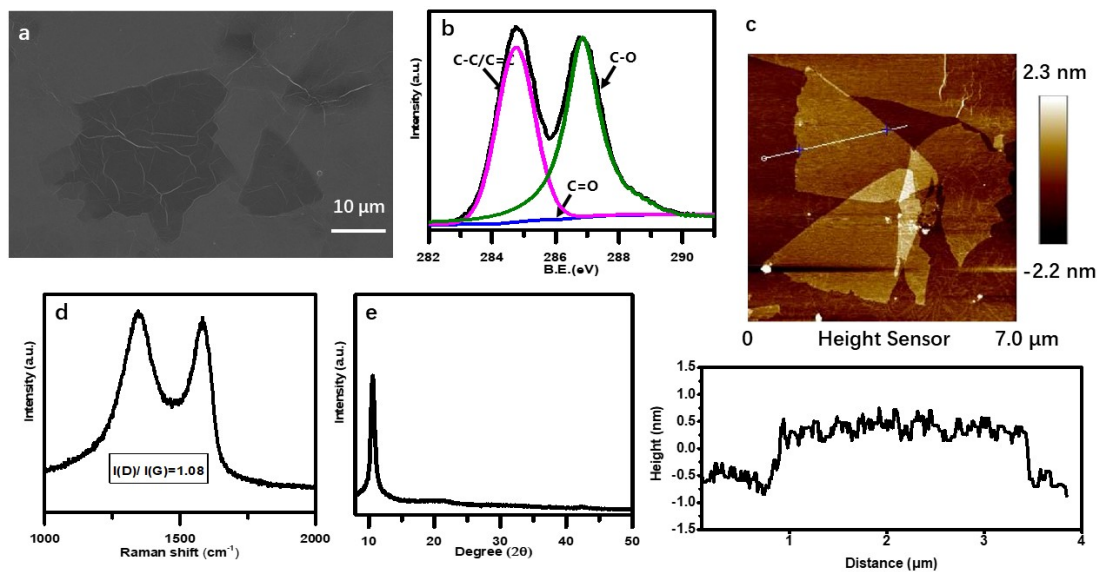
清华大学化工系高分子研究所, 清华大学教育部先进材料重点实验室, 北京 100084

### **Key Factors Affecting Rheological Behavior of High-Concentration Graphene Oxide Dispersions and Population Balance Equation Model Analysis**

Henan Mao, Xiaogong Wang \*

Department of Chemical Engineering, Laboratory of Advanced Materials (MOE), Tsinghua University, Beijing 100084, P. R. China.

\*Corresponding author. Email: wxg-dce@mail.tsinghua.edu.cn; Tel.: +86-13910665160.

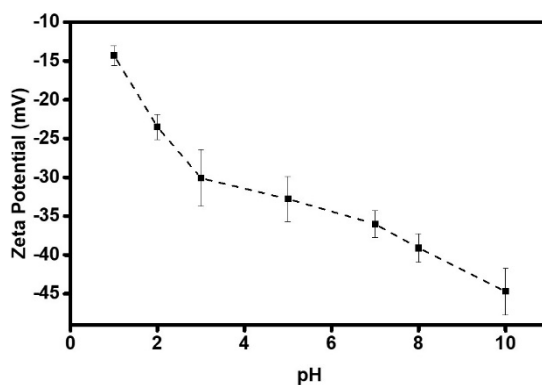


图S1 氧化石墨烯的(a) SEM图谱; (b) C 1s的XPS图谱; (c)单层纳米片的AFM图; (d)拉曼光谱图; (e) XRD图谱  
 Fig. S1 (a) The SEM image of the GO sheets, (b) C 1s XPS spectra, (c) AFM image of the single-layer nanosheets, (d) Raman spectrum of GO, (e) XRD curve of GO.

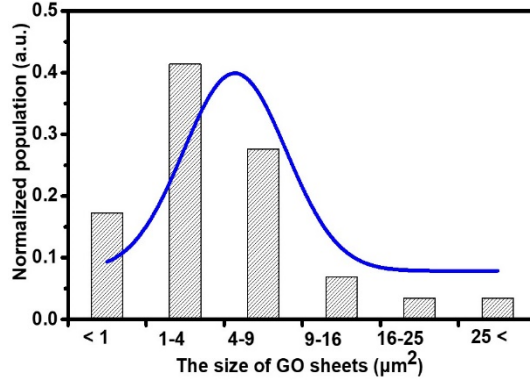
## S1 结构表征

GO片典型的SEM图如图S1a所示,该图像显示了不规则的形状和尺寸分布。通过XPS分析GO片的表面化学组成。如图S1b所示,GO的C1s XPS光谱可分为三个峰:C-C(284.8 eV),C-O(286.9 eV)和C=O(288.7 eV)。图1c显示了GO片的AFM图像,单片GO层的厚度约为0.6 nm。GO样品的芳香晶格通过拉曼光谱法进行了表征(图S1d)。光谱中在1596和1345  $\text{cm}^{-1}$ 处达到峰值的两个谱带分别属于石墨烯片的G和D谱带。图S1e显示了X射线衍射(XRD)衍射峰出现在二倍角度数为 $11^\circ$ 左右。

## S2



图S2 pH值对GO水分散液的Zeta电位的影响  
 Fig. S2 Zeta potential of GO aqueous dispersion as a function of pH.



图S3 GO片尺寸分布统计

Fig. S3 Statistics of normalized population on the size of GO sheets.

#### S4 汤姆逊模型本构方程

根据并联规则，

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon$$

$$\tau_0 = \tau_1 + \tau_2$$

$$\dot{\varepsilon}_1 = \dot{\varepsilon}_2 = \dot{\varepsilon}$$

$$\dot{\tau}_0 = \dot{\tau}_1 + \dot{\tau}_2$$

由 Maxwell 的本构关系可得

$$\dot{\varepsilon} = \frac{1}{E_1} \dot{\tau}_1 + \frac{1}{\eta} \tau_1$$

$$\tau_1 = \eta \dot{\varepsilon} - \frac{\eta}{E_1} \dot{\tau}_1$$

由胡克弹簧可得

$$\tau_2 = E_2 \varepsilon$$

$$\dot{\tau}_2 = E_2 \dot{\varepsilon}$$

根据以上式子，可以推导

$$\dot{\tau}_1 = \dot{\tau}_0 - \dot{\tau}_2 = \dot{\tau}_0 - E_2 \dot{\varepsilon}$$

$$\tau_1 = \eta \dot{\varepsilon} - \frac{\eta}{E_1} (\dot{\tau}_0 - E_2 \dot{\varepsilon}) + E_2 \varepsilon$$

最终得到汤姆逊模型的本构方程

$$\dot{\tau}_0 + \frac{E_1}{\eta} \tau_0 = (E_1 + E_2) \dot{\varepsilon} + \frac{E_1 E_2}{\eta} \varepsilon$$

蠕变方程：

当在恒定的应力作用下，此时  $\dot{\tau}_0 = 0$ ，则本构方程变为：

$$\frac{E_1}{\eta} \tau_0 = (E_1 + E_2) \dot{\varepsilon} + \frac{E_1 E_2}{\eta} \varepsilon$$

解以上微分方程，可得：

$$\varepsilon = \frac{\tau_0}{E_2} \left( 1 - \frac{E_1}{E_1 + E_2} e^{-\frac{E_1 E_2}{(E_1 + E_2) \eta} t} \right)$$

弹性后效：

当模型在受恒载  $\tau_0$  的  $t = t_1$  时刻突然卸载，此时产生的应变为

$$\varepsilon_{t_1} = \frac{\tau_0}{E_2} \left( 1 - \frac{E_1}{E_1 + E_2} e^{-\frac{E_1 E_2}{(E_1 + E_2) \eta} t_1} \right)$$

为了研究模型卸载后应变变化情况，令此时刻为 0 时刻，即  $t = 0$ ，并且有  $\tau_0 = \dot{\varepsilon}_0 = 0$ ，可得

$$(E_1 + E_2) \dot{\varepsilon} + \frac{E_1 E_2}{\eta} \varepsilon = 0$$

解以上微分方程，可得：

$$\varepsilon = \varepsilon_{t_1} e^{-\frac{E_1 E_2}{(E_1 + E_2) \eta} t_1}$$

将测得的松弛曲线用该方程拟合，可得到汤姆逊模型  $E_1$ ， $E_2$ ， $\eta$  三个参数。