

# 基于多物理场模拟的石墨烯改性水泥电热力学性能分析

杜春华, 张一梅\*

华北电力大学环境科学与工程学院, 北京

收稿日期: 2026年1月28日; 录用日期: 2026年2月23日; 发布日期: 2026年3月4日

## 摘要

复合电热水泥材料在智能建筑、路面融雪、结构监测等领域具有广阔应用前景, 然而, 现有研究多局限于定性或单尺度分析, 缺乏从微观结构到宏观性能的跨尺度定量关联。本研究构建了一个微观 - 宏观跨尺度分析框架, 基于COMSOL Multiphysics建立了石墨烯 - 水泥基复合材料的多尺度模型。该模型涵盖微观代表体积分元(REV)及宏观试件两个层面: 首先通过自编随机分布算法生成石墨烯掺杂水泥的REV微观模型, 基于胡克定律焦耳定律及傅里叶定律开发了材料等效性能参数计算方法, 系统研究掺量在0.1~1.2 wt%范围内材料的性能变化; 进而建立宏观试件的电 - 热 - 力学多物理场耦合模型, 分析其在外电压作用下的结构响应与性能演化规律, 并进行相关实验。0.8 wt%石墨烯为最优掺量, 水泥基复合材料电 - 热 - 力学性能协同提升: 弹性模量提高12.2%, 电阻率降低63.4%, 导热系数跃升128.5%, 实现电热力学综合性能最优化。36 V电压下材料可实现有效且均匀的温升, 同时热位移可控, 兼顾了性能需求与工程安全标准, 并且与实际相比误差较小。试件的多物理场模拟揭示了材料电 - 热 - 力响应与相互作用的内在机制: 电场决定焦耳热源分布, 热传导与边界散热耦合形成稳定的温度场, 在机械约束下引发非均匀的应力应变。本研究实现了从纳米尺度结构设计到宏观性能预测的跨尺度关联, 为石墨烯改性水泥基电热材料的优化设计与工程应用提供了系统的理论依据。

## 关键词

石墨烯, REV模型, 等效性能, 试件模型, 工况电压, 电 - 热 - 力学耦合

## Analysis of Electrothermal and Mechanical Properties of Graphene-Modified Cement Based on Multiphysics Simulation

Chunhua Du, Yimei Zhang\*

College of Environmental Science and Engineering, North China Electric Power University, Beijing

\*通讯作者。

文章引用: 杜春华, 张一梅. 基于多物理场模拟的石墨烯改性水泥电热力学性能分析[J]. 材料科学, 2026, 16(3): 1-13.  
DOI: 10.12677/ms.2026.163045

## Abstract

Composite electrothermal cement materials hold broad application prospects in intelligent buildings, road snow melting, and structural monitoring. However, existing research is mostly limited to qualitative or single-scale analyses, lacking quantitative cross-scale correlations from microstructure to macroscopic performance. This study establishes a micro-macro cross-scale analysis framework and develops a multiscale model of graphene-cement-based composites based on COMSOL Multiphysics. The model spans two levels: a microscopic Representative Volume Element (REV) and a macroscopic specimen. First, a self-developed random distribution algorithm is employed to generate the REV microstructure model of graphene-doped cement. A method for calculating the equivalent material performance parameters is developed based on Hooke's law, Joule's law, and Fourier's law, systematically investigating the performance variations of the material within the graphene content range of 0.1~1.2 wt%. Subsequently, a multiphysics coupling model for electro-thermo-mechanical analysis is established at the macroscopic specimen level to analyze its structural response and performance evolution under applied voltage, accompanied by corresponding experiments. The optimal graphene content is identified as 0.8 wt%, resulting in synergistic enhancement of the electro-thermal and mechanical properties of the cement-based composite: the elastic modulus increases by 12.2%, electrical resistivity decreases by 63.4%, and thermal conductivity rises significantly by 128.5%, achieving optimal comprehensive electro-thermo-mechanical performance. Under a 36 V voltage, the material achieves effective and uniform temperature rise while maintaining controllable thermal displacement, satisfying both performance requirements and engineering safety standards, with minimal deviation from experimental results. The multiphysics simulation of the specimen reveals the intrinsic mechanism of electro-thermo-mechanical responses and interactions: the electric field determines Joule heat distribution, heat conduction couples with boundary heat dissipation to form a stable temperature field, which induces non-uniform stress and strain under mechanical constraints. This study establishes a cross-scale correlation from nanoscale structural design to macroscopic performance prediction, providing a systematic theoretical basis for the optimized design and engineering application of graphene-modified cement-based electrothermal materials.

## Keywords

Graphene, Multiphysics Simulation, Electrothermal Properties, Thermomechanical Properties, Stress-Strain

Copyright © 2026 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

## 1. 引言

传统水泥基材料存在导电导热性差、脆性大等问题,限制了其在智能化工程中的应用。石墨烯掺杂水泥凭借其显著提升的力学性能、导电性与导热性,为土木工程、智能建筑、道路融冰及结构监测等领域提供了新的功能性解决方案[1]-[5]。

二维碳基材料石墨烯从散装石墨中机械剥离获得[6],在聚合物、金属及陶瓷等基体中的应用已展现出显著的改性效果[7]-[9]。Mayorov 等研究石墨烯包裹在六角氮化硼中可以显著提升负弯曲抵抗[10]。李

泽鑫在水泥中添加少量石墨烯强度增 12%，抑制收缩 30%，改善基体的微观结构致密性[11]。VanDacHo 等添加 PRG 可增强砂浆强度，超大尺寸最佳，大尺寸改善抗拉强度，小尺寸不显著[12]。Ming Jin 等通过交直流电与显微表征石墨烯复合水泥材料，发现 0.8%~1.8%渗透阈值，切片具有完整的导电网络和聚集现象，特殊的形态特征和 EDS 技术元素定量区分水合产物[13]。张雪梅以普通硅酸盐水泥 P.O42.5 为基体，添加 0.08%石墨烯可加速水化，提高密实度，28 天抗压强度达 48.62 MPa，60 次冻融后相对动弹性模量 94.02%，显著改善力学与抗冻性能[14]。为深入理解石墨烯在水泥基体中的增强机制，基于有限元的数值模拟方法被广泛应用，代表性体积元(REV)模型结合均质化理论，可有效表征复合材料的性能预测。陈敏通过正交试验、通电加热及有限元模拟，发现复相导电水泥材料在 60 V 电压下升温 11.9℃，电阻率与应变高度相关，热变形规律稳定可逆，适用于融雪及结构监测[15]。李楠通过 Ansys 数值模拟与四电极实验方法，研究 0.07 wt%石墨烯水泥基复合最佳掺量，石墨烯能形成导电网络显著提升力学性能，电阻变化率与荷载呈稳定相关性，且优化分布可改善热传导特性，为智能建筑材料提供新方案[16]。傅孝良等通过有限元软件模拟石墨烯改性水泥净浆电热性能，发现 30 V 电压通电后温度 333℃、应力 80 MPa、位移 0.14 mm [17]。现有研究大多停留在定性云图分析，难以提取等效本构参数以精确指导掺杂。此外，实际工况模拟多限于单电压、单尺度，缺乏微观至宏观的定量关联与跨尺度分析。

基于以上分析，本研究创新地构建了从微观代表体积元到宏观试件的多尺度模型体系。首先，通过随机分布算法建立石墨烯掺杂水泥 REV 模型，并基于修正的本构方程计算不同掺量复合水泥的等效电导率、热导率与弹性模量，确定最优掺杂比例。其次，将等效参数赋予均质模型，进行电-热-力耦合分析，以温度与位移响应确定最佳工作电压，并进行实验验证，最后，在最优掺量与最优实际工况电压下，分析材料内部电-热-力多场耦合的传递。该研究实现了从纳米结构设计到宏观性能预测的跨尺度关联，为智能电热水泥基材料的性能设计与工程应用提供了系统的理论依据与数据支持。

## 2. 研究方法

本研究基于 COMSOL Multiphysics 平台，首先构建参数化三维 REV 模型，模拟石墨烯改性水泥基材料的电热力学性能，计算 0.1~1.2 wt%掺量下复合材料的等效电阻率、导热系数与弹性模量，确定最优掺量，其次，建立实际工况模型，分析不同电压下温度、位移变化，确定最佳工作电压。最后，在最佳掺杂比例与安全工作电压条件下揭示了材料电-热-力响应与相互作用的内在机制。

### 2.1. 掺杂量对电热力学性能研究

#### 2.1.1. REV 模型等效参数计算

运用 COMSOL 生成 REV 模型，模拟不同石墨烯掺量下应力应变、电流密度、温度及热流密度分布。此模型为理想界面、线弹性、无损伤的简化模型。建模假设：石墨烯复合水泥基材料均质各向同性、石墨烯均匀随机无团聚、界面完美结合；力学场小变形线弹性；电学场稳态直流，忽略量子隧穿效应，假设电流仅通过物理接触产生导电通路，忽略电介质的极化现象，忽略接触电阻；传热场仅考虑热传导，忽略对流传热、辐射传热与界面热阻。

为研究增强体掺量对水泥材料抗压抗拉性能的影响，基于 REV 模型与胡克定律，对材料的弹性模量进行计算，复合材料的等效弹性模量为等效为等效应力与等效应变的比值(式(1)~(4)) [18]。

宏观胡克定律：

$$E = \frac{\sigma}{\varepsilon} \quad (1)$$

其中，等效应力为：

$$\sigma = \frac{1}{V_0} \sum_{i=1}^n \sigma_i V_i \quad (2)$$

等效应变:

$$\varepsilon = \frac{1}{V_0} \sum_{i=1}^n \varepsilon_i V_i \quad (3)$$

等效弹性模量:

$$E_{eff} = \frac{\sum_{i=1}^n \sigma_i V_i}{\sum_{i=1}^n \varepsilon_i V_i} \quad (4)$$

其中,  $E$  是弹性模量,  $\sigma$  是应力,  $\varepsilon$  是应变,  $V_0$  是材料总体积,  $E_{eff}$  是等效弹性模量。

为研究增强体掺量对于水泥材料导电性的影响, 基于 REV 模型与焦耳定律进行计算复合材料的有效电阻率(式(5)~(9)) [19]。

电阻决定式:

$$R = \rho_{eff} \frac{L}{S} \quad (5)$$

焦耳定律:

$$P = \frac{U^2}{R} \quad (6)$$

电导率:

$$\sigma = \frac{1}{V_0} \sum_{i=1}^n \sigma_i V_i \quad (7)$$

电损耗:

$$P \approx \sum_{i=1}^n \sigma_i |\nabla \phi_i|^2 V_i \quad (8)$$

电阻率:

$$\rho_{eff} = \frac{U^2 S}{L \left( \sum_{i=1}^n \sigma_i |\nabla \phi_i|^2 V_i \right)} \quad (9)$$

其中,  $R$  是材料整体电阻,  $\rho_{eff}$  是材料的等效电阻率,  $L$  是材料长度,  $S$  是材料横截面积,  $P$  是电损耗,  $U$  是施加在材料两端的电压,  $\sigma$  是等效电导率。

为研究增强体掺量对于水泥材料导热性能的影响, 基于 REV 模型与傅里叶定律进行计算复合材料的有效导热系数(式(10)~(12)) [20]。

$$q = -k \nabla T \quad (10)$$

在有限元计算中:

$$q = \frac{1}{S_0} \sum_{i=1}^n Q_i S_i \quad (11)$$

热导率:

$$k_{eff} = - \frac{\sum_{i=1}^n Q_i S_i}{\nabla T S_0} \quad (12)$$

其中,  $q$  是单位时间内通过单位面积的热流量,  $k$  是热导率,  $\nabla T$  是温度梯度( $\text{K}\cdot\text{m}^{-1}$ ),  $k_{eff}$  是等效导热系数。

### 2.1.2. REV 几何模型建立

本研究的三维 REV 几何模型运用自己开发的随机分布算法, 在 COMSOL Multiphysics 软件的模型开发器中实现 REV 模型构建。该方法总流程为基体创建、增强体序列化随机投放、碰撞检测、几何合成。第一步建立边长为 150 nm 的水泥基体; 第二步建立随机分布的石墨烯增强体, 并进行边界合规性检查以及重叠干涉检测, 设置最大尝试次数与趋于优化, 保证增强体随机投放与不重叠, 生成正确的增强体; 第三步, 几何布尔并集操作形成联合体。成功建立石墨烯增强水泥基体的 REV 模型, 如图 1(a)。水泥基体边长 150 nm, 石墨烯厚度为 0.335 nm。模型与网格划分如图 1(b)。

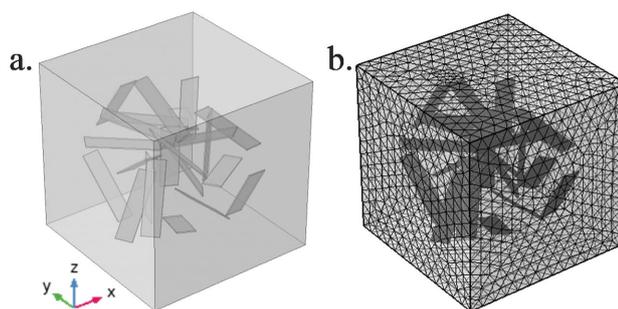


Figure 1. Geometric illustration of the REV model (a) and mesh quality distribution (b)

图 1. REV 模型几何示意(a)与网格质量分布(b)

### 2.1.3. REV 模型参数及边界条件

在力学性能模拟时, 采用固定 REV 底面( $Z=0$ ), 在顶面施加载荷, 其余四面自由。在电学性能模拟时, 在 REV 相对面进行施加电压, 在 REV 底面接地, 另一侧施加为  $2 \times 10^{-5}$  V 的电压, 其余四个面为电绝缘。在热学性能模拟时, 在 REV 底面( $Z=0$ )设置 273.15 K, 另一侧为 274.15 K, 其余四个面为热绝缘。水泥电阻率为  $64 \Omega\cdot\text{m}$  (实测值), 其余相关属性见表 1。该模型以 0.1 wt% 的步长, 0.1 wt%~1.2 wt% 掺量下, 石墨烯掺杂水泥的力学性能、电学性能及热学性能, 并基于此进行相关实验验证。

Table 1. Parameters of the REV model

表 1. REV 模型参数表

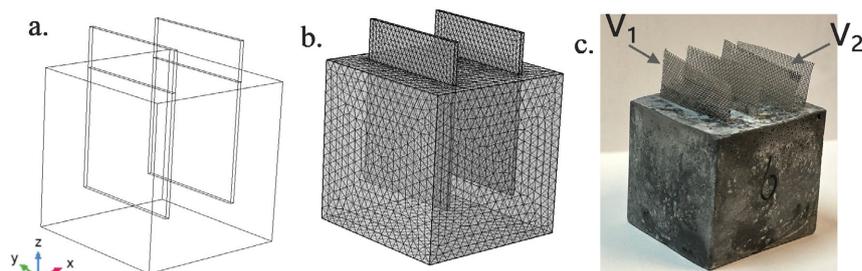
材料物理性能	水泥基体[21]	石墨烯[3] [15] [22] [23]
弹性模量(GPa)	7.42	1050
泊松比	0.25	0.186
电阻率( $\Omega\cdot\text{m}$ )	7.42	1050
泊松比	0.25	0.186
热导率( $\text{W}(\text{m}\cdot\text{K})^{-1}$ )	1.51	5000
比热( $\text{J}(\text{kg}\cdot\text{K})^{-1}$ )	1050	750

## 2.2. 应用性能研究

### 2.2.1. 试件模型选定及几何设定

为预测不同工况下的石墨烯增强水泥, 进行通电时的温度场变化、电场、电流分布、应力 - 应变以

及位移大小的多物理场演化分析, 本研究所建立的多尺度耦合模型基于以下关键假设, 石墨烯与水泥基体界面完美结合, 忽略接触电阻与界面热阻; 材料表现为线弹性行为, 未考虑塑性变形与损伤演化; 电-热-力耦合过程为静态一次加载, 未涉及循环载荷下的疲劳效应。选择电流、固体传热和固体力学单物理场以及电磁热、热膨胀多物理场。试件尺寸为边长 4 cm 的复合水泥材料, 电极材料为尺寸长 4.5 cm, 宽 3 cm, 厚 0.1 cm 的铜片。两电极片距离水泥边缘都为 0.9 cm, 插入复合水泥 3 cm, 如图 2(a)。如图 2(b), 网格划分为根据物理场的自由四面体。并基于试件模型进行实验验证, 如图 2(c)。



**Figure 2.** Geometric illustration of the actual specimen model (a), mesh quality distribution (b) and experimental specimen (c)  
**图 2.** 实际试件模型几何示意(a)、网格质量分布(b)与实验试件(c)

### 2.2.2. 试件模型参数及边界条件

复合材料水泥的电阻率, 热导率和弹性模量等数据, 随石墨烯增强体的掺杂量不同而改变, 选取最优掺杂量对应具体数值, 由 2.1 计算结果赋参。密度  $2400 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ , 热膨胀系数  $1.5 \times 10^{-5}$ 。模型电学边界为电极片, 施加电压  $V_1$  为 10 V, 20 V, 30 V, 40 V, 50 V, 60 V, 热学边界地面绝热, 其余表面自然对流, 对流系数  $4.11 \text{ W}(\text{m}^2\cdot\text{K})^{-1}$ , 环境温度  $22^\circ\text{C}$ 。力学边界, 采用固定底面( $Z=0$ )、侧面( $X=0, X=0.04$ )以及电极片底部。其余面自由变形[15][17][24]。并进行重点研究最佳石墨烯掺杂量, 最佳电压下的电热力学性能演化分析。

## 3. 结果与讨论

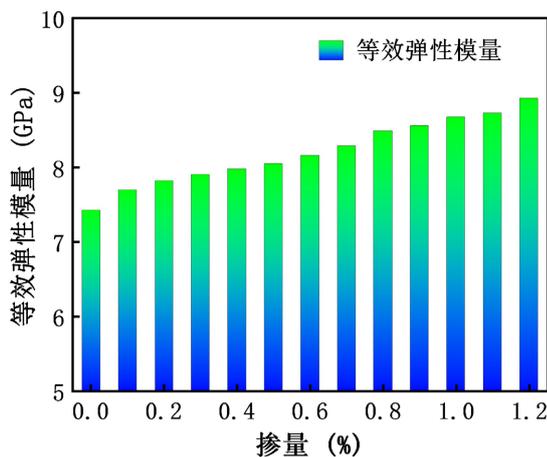
### 3.1. 电热力学性能的影响

#### 3.1.1. 石墨烯掺杂对力学性能的影响

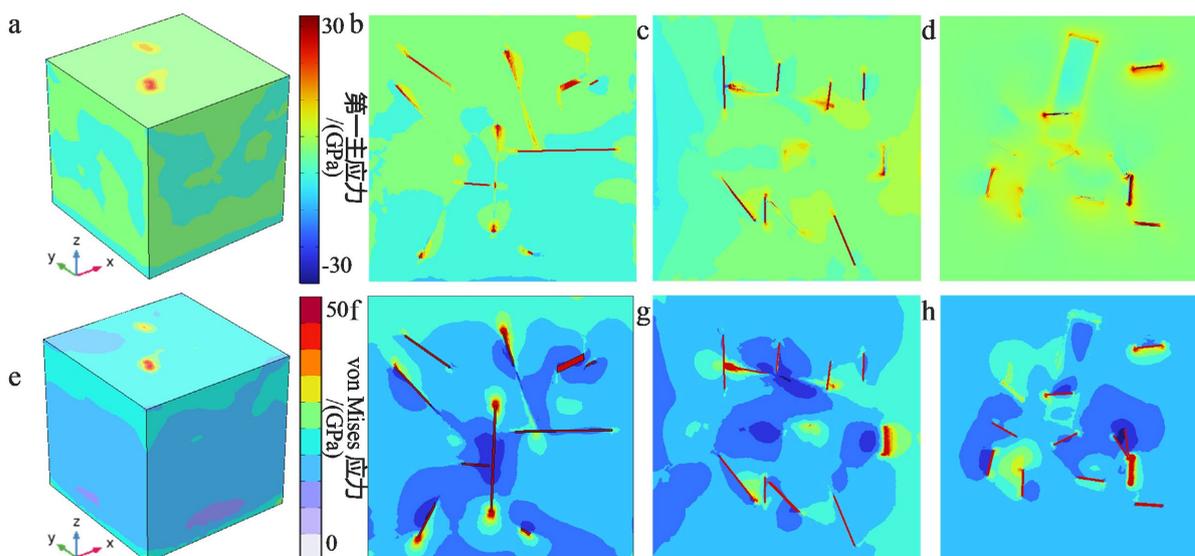
石墨烯掺杂量为 0.1~1.2 wt% 的等效弹性模量的计算结果如图 3, 随着石墨烯掺杂量增加, 石墨烯掺杂水泥复合材料的等效弹性模量显著提升。主要是因为石墨烯本身具有极高的本征模量, 在承受载荷时能有效分担并传递应力, 从而强化基体。

不同掺杂量应力分布特征较为相似, 选取掺杂量 0.8 wt% 进行分析, 应力分布如图 4, 应力云图颜色由蓝变红, 表征应力逐渐增至最大。第一主应力是评估材料脆性断裂风险的关键指标, 当达到其抗拉强度极限, 则材料将发生开裂或脆性断裂。从图 4(a)、图 4(e)可以看出在添加 0.8 wt%, 第一主应力与屈服应力为绿色和蓝色低应力均匀分布。由内部剖面图 4(b)~(d)可知, 发现主要的高应力区域分布在增强体位置, 观察图 4(b)、图 4(c), 发现石墨烯增强体与水泥基体的界面处应力梯度大, 容易发生脱粘破坏。Von Mises 等效应力是判断塑性材料屈服强度的指标, 当达到某应力极限, 材料将会屈服破坏。由内部剖面图 4(f)、图 4(g)、图 4(h), 内部屈服应力分布呈明显差异, 水泥基体所受应力较低, 高应力分布在石墨烯增强体上, 其周边基体应力水平较低, 呈现蓝色, 这说明石墨烯增强体具有良好的力学承载能力, 能有效分担周围基体的应力, 随着掺杂量提升且分布趋于均匀, 增强体对应力分担作用更加显著, 有助于使

应力分布更均匀, 减轻应力集中, 从而降低水泥基体的破坏风险。由内部剖面图 4(f)、图 4(g)可知, 受载方向 z 轴上下两端的应力分布较为明显, 且该区域应力较高, 表明这些位置较易发生屈服破坏; 而两侧应力相对较小, 破坏风险较低。



**Figure 3.** Effective elastic modulus of graphene-doped cement-based composites  
**图 3.** 石墨烯掺杂水泥基等效弹性模量

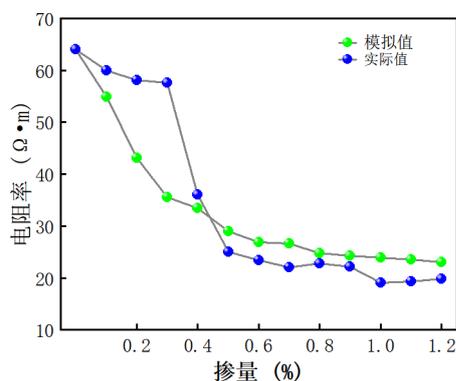


**Figure 4.** First principal stress (a~d) and von Mises stress (e~h) distributions in the 0.8 wt% graphene-doped cement REV model and its cross-sections at x, y, z = 75 nm

**图 4.** 0.8 wt% 石墨烯掺杂水泥 REV 模型的体及 x、y、z = 75 nm 切面的第一主应力图(a~d)和 von Mises 应力图(e~h)

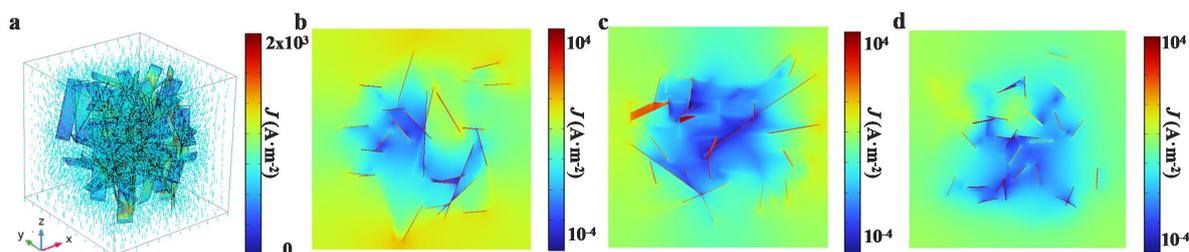
### 3.1.2. 石墨烯掺量对电学性能的影响

石墨烯掺量为 0.1~1.2 wt% 的等效电阻率如图 5, 石墨烯的高导电性使其在基体中形成导电网络, 复合材料的有效电阻率随着石墨烯增强体的添加量而逐渐下降, 下降速率逐步减缓, 掺量 0.6 wt% 之后, 电阻下降速率变缓, 掺量 0.3 wt% 之后, 电阻率变化缓慢, 掺量 0.8 wt% 之后, 电阻率几乎不变。对比模拟与实际值可知, 在实际实验中, 电阻率在石墨烯掺量 0.4 wt% 时急速下降, 实验值总体低于模拟值, 模拟值更接近线性, 实验与模拟存在差异, 主要是未考虑隧道效应[19], 但最终稳定效果相差较小。



**Figure 5.** Resistivity of graphene-doped cement-based composites  
**图 5.** 石墨烯掺杂水泥基电阻率

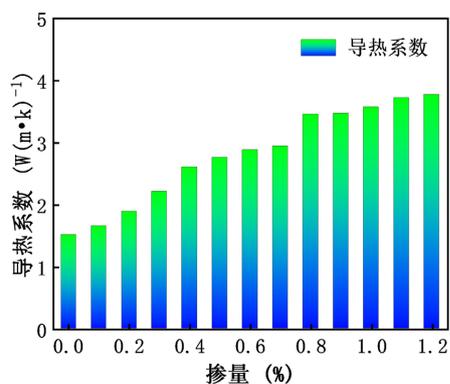
选取 0.8 wt% 如图 6, 复合材料内部的电流密度显著提升, 基体形成导电通路, 石墨烯体积分数增加, 石墨烯形成了连续、稳定的导电通路, 电流主要聚集在石墨烯导电相。石墨烯在水泥基体中的分散均匀性对电阻率也具有显著影响。分布越均匀, 导电网络越完整, 局部电流集中现象越少。



**Figure 6.** Current density distributions in the 0.8 wt% graphene-doped cement REV model and its cross-sections at  $x, y, z = 75 \text{ nm}$  (a~d)

**图 6.** 0.8 wt% 石墨烯掺杂水泥 REV 模型的体及  $x, y, z = 75 \text{ nm}$  切面的电流密度图(a~d)

### 3.1.3. 石墨烯掺量对热学性能的影响

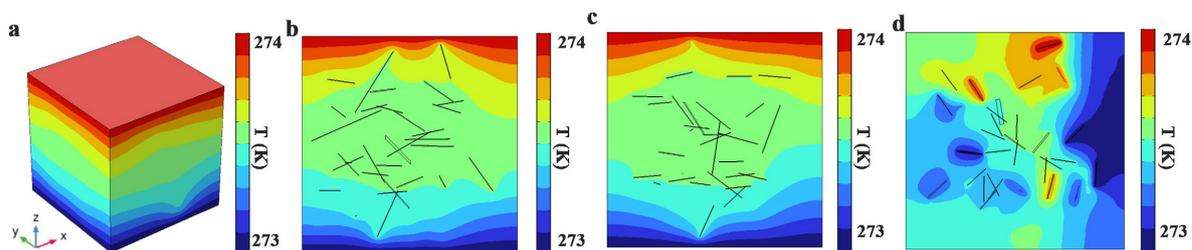


**Figure 7.** Thermal conductivity of graphene-doped cement-based composites  
**图 7.** 石墨烯掺杂水泥基导热系数

石墨烯掺量为 0.1~1.2 wt% 时的等效导热系数计算结果如图 7, 复合材料的导热系数随着石墨烯增强体的添加量而逐渐上涨。石墨烯卓越的导热能力改善热学性能, 其掺入为基体构建了高效的热传导路径,

使复合材料导热系数不断提高。

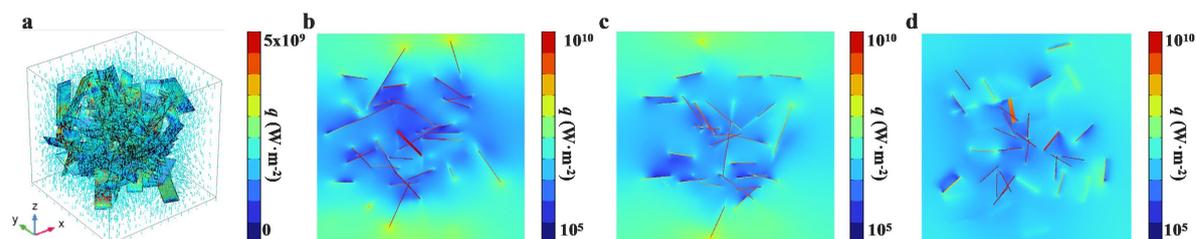
0.8 wt%温度云图如图 8, 由图 8(a)可知, 温度呈现梯度向下降。由图 8(b)、图 8(c)可知, 石墨烯周围温度分布不均, 石墨烯加剧内部热传递, 石墨烯自身导热率较高, 且 0.8 wt%掺量下, 形成连续均匀的导热路径。从图 8(d)可知, 墨烯的导热率远高于水泥基体, 导致石墨烯增强体与基体界面处的温度低于周围水泥基体。因此, 石墨烯能够显著改善水泥基体的热传导性能。



**Figure 8.** Temperature distributions in the 0.8 wt% graphene-doped cement REV model and its cross-sections at  $x, y, z = 75$  nm (a~d)

**图 8.** 0.8 wt%石墨烯掺杂水泥 REV 模型的体及  $x, y, z = 75$  nm 切面的温度分布图(a~d)

在石墨烯增强水泥基体的热流密度分布中, 复合水泥材料内部的热流密度为不均匀分布, 由图 9(a)可以看出内部热流, 由图 9(a)~(c)可以看出, 石墨烯所在位置热流密度较高, 其余位置热流密度较小, 当石墨烯纳米片的排列方式与施加载荷一致时, 热流密度较高, 垂直时, 热流密度传递较低。



**Figure 9.** Heat flux distributions in the 0.8 wt% graphene-doped cement REV model and its cross-sections at  $x, y, z = 75$  nm (a~d)

**图 9.** 0.8 wt%石墨烯掺杂水泥 REV 模型的体及  $x, y, z = 75$  nm 切面的热流密度分布图(a~d)

随着石墨烯掺杂量的增加, 复合材料的等效弹性模量提升, 电阻率下降, 导热系数提高。掺量达到 0.8 wt%时, 电阻率下降趋势趋于平缓, 导电网络已形成, 达到渗流阈值。此时材料综合性能实现协同优化, 弹性模量提升 12.2%, 电阻率降低 63.4%, 导热系数提高 128.5%。并且石墨烯纳米片比表面积大、易团聚。所以, 从实际应用考虑, 继续增加石墨烯, 会增高成本, 性能增益的边际效益递减。综合权衡力学增强、导电导热效能、分散工艺可行性及经济成本等因素, 0.8 wt%被确定为该复合材料的最佳掺量。

## 3.2. 应用性能研究

### 3.2.1. 不同电压条件下的电热性能

本研究选取 0.8 wt%石墨烯作为最佳掺量, 绘制出温度变化曲线和位移变化曲线。由图 10(a)可知, 随着施加电压的升高, 整体温度呈现显著上升趋势。在 10 V 低电压条件下, 材料整体温度处于较低水平, 当电压升至 30 V 时, 材料峰值温度达到 85°C, 当电压提升至 40 V 时, 材料温度 135°C。

由图 10(b)可知, 随着施加电压的升高, 材料的位移变形增大, 具体而言, 在低压区间, 材料驱动应变较小, 结构约束力可有效抵消大部分应变, 使得位移处于较低水平; 当电压升至 40 V 时, 最大体积位

移仅为 0.055 mm, 整个系统维持在低应力、小位移的稳定状态; 当电压进一步提升至 50 V 时, 最大体积位移增至 0.09 mm, 热应力显著增大, 进而导致材料应变呈急剧增长态势。材料的体积应变主要由热膨胀效应引发, 其变化规律与温度场分布密切相关。结合前文电压 - 温度特性可知, 随着施加电压的升高, 材料温度显著上升, 热膨胀程度加剧, 对应体积位移呈现逐渐增大的趋势。其中, 材料的高模量特性及结构边界条件可对部分热膨胀应变起到抑制作用, 掺杂体系可通过自身特性与结构约束调控应变及位移变化。

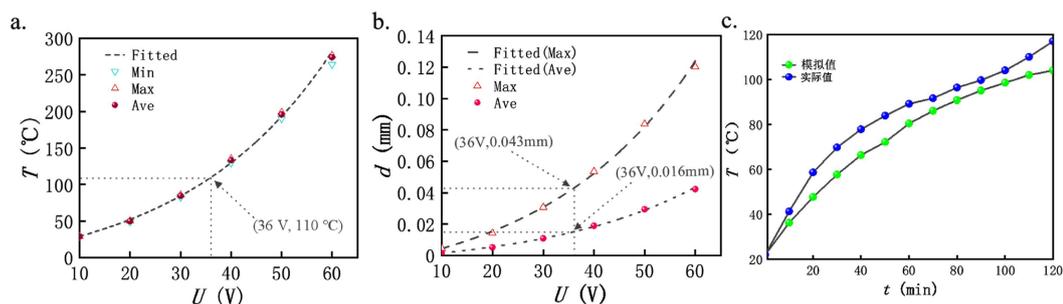


Figure 10. Evolution of temperature (a) and displacement (b) in the actual specimen

图 10. 实际试件温度变化(a)、位移变化(b)和 36 V 试件温度变化(c)

综合热学与力学性能分析, 0.8 wt% 石墨烯掺杂水泥材料在电压作用下表现出显著的电热响应与热变形行为。材料温度随电压升高呈非线性增长, 30 V 时达 85°C, 40 V 时突破 135°C; 同时, 体积位移在 40 V 以下保持稳定, 50 V 时则急剧增至 0.08 mm。从工程应用角度考量, 基于应用需求、结构安全以及安全规范性综合考量, 36 V 下温度 110°C, 位移最大 0.043 mm, 并且是国际公认人体安全电压上限, 所以 36 V 为最优工作电压。由图 10(c)可知, 在 36 V 工作电压下, 在 120 分钟内, 温度随时间逐渐升高而升高, 并且模拟值与实验值变化规律与数值相似, 误差较小。

### 3.2.2. 0.8~36 V 工况下的多物理场演化分析

本研究选取最佳石墨烯掺杂量 0.8 wt% 的水泥, 加载安全电压 36 V 进行多物理场耦合分析, 揭示电流分布、焦耳热产生、温度场变化最终导致应力演化。

电流电势分布决定焦耳热初始格局。由图 11(a)和图 11(b), 电流由高电势流向低电势, 两电极中间形成集中的高电流密度通道。主要因为石墨烯掺杂在水泥基体中形成有效三维导电网络。由图 12 电流密度模可知, 电极片上侧及中间区域电流较大, 呈现以中间为高点向下方及左右对称递减的趋势; 电极外侧及未插入部分电流密度较小, 整体形成由中心向边缘递减的对称分布模式。该分布格局为后续均匀产热奠定了有利基础。有利于后续产热。

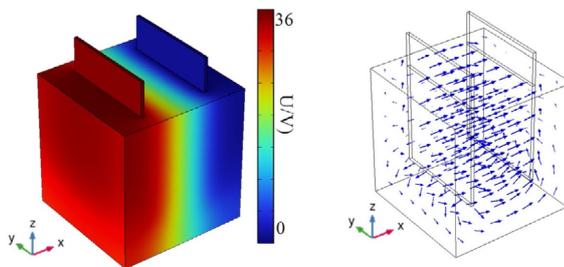
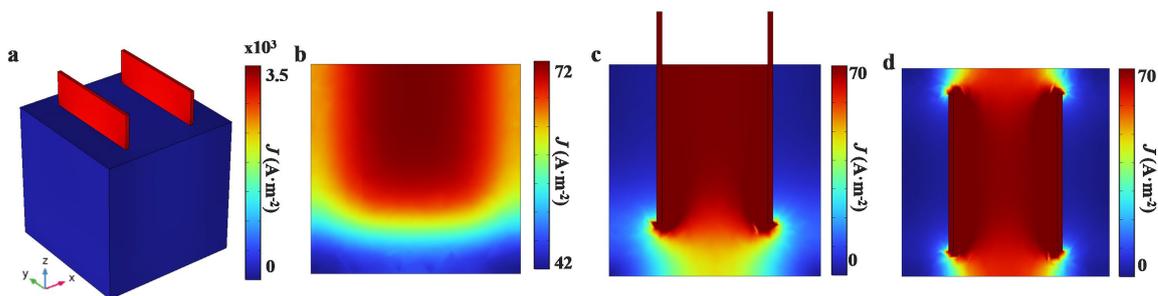


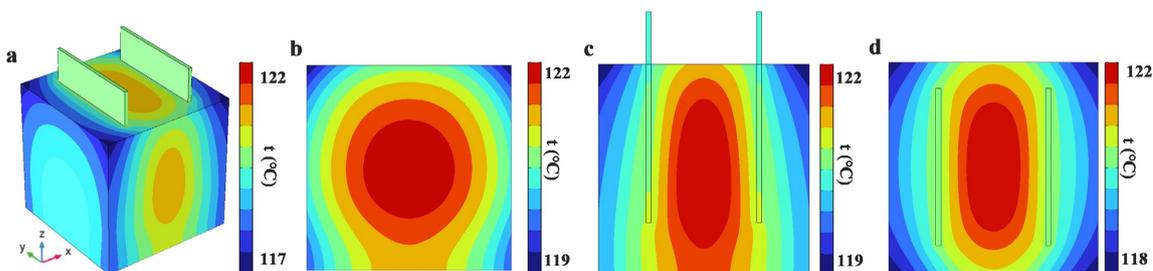
Figure 11. In the actual specimen evolution of temperature (a) and displacement (b)

图 11. 实际试件电势分布(a)与电流流向(b)



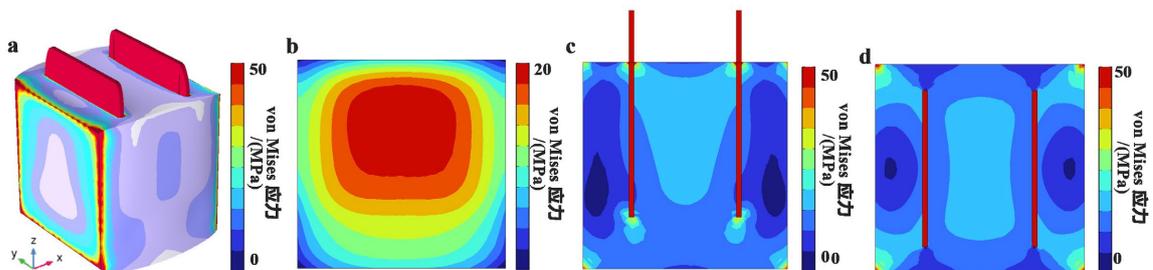
**Figure 12.** Current density magnitude distributions in the specimen and its cross-sections at  $x, y, z = 75 \text{ nm}$  (a~d)  
**图 12.** 试件体及  $x, y, z = 75 \text{ nm}$  切面的电流密度模(a~d)

焦耳热分布在散热边界条件耦合形成稳定温度场。由图 13 可知, 温度场与电流密度分布具有同步性, 但受非对称散热条件影响显著, 试样下方为绝热边界, 热量易积聚; 上方与电极片处存在对流散热, 热量散失较快。因此, 虽然电流密度最大值位于两电极中间正上方, 但实际最高温度出现在中间偏下区域, 并自此向四周递减。温度最低值则出现在对流散热强烈的边界及远离热源的内角位置。整体温度分布较为均匀, 最高与最低温差较小, 表明材料内部的热传导与扩散较为充分。



**Figure 13.** Temperature distributions in the specimen and its cross-sections at  $x, y, z = 75 \text{ nm}$  (a~d)  
**图 13.** 试件体及  $x, y, z = 75 \text{ nm}$  切面的温度分布图(a~d)

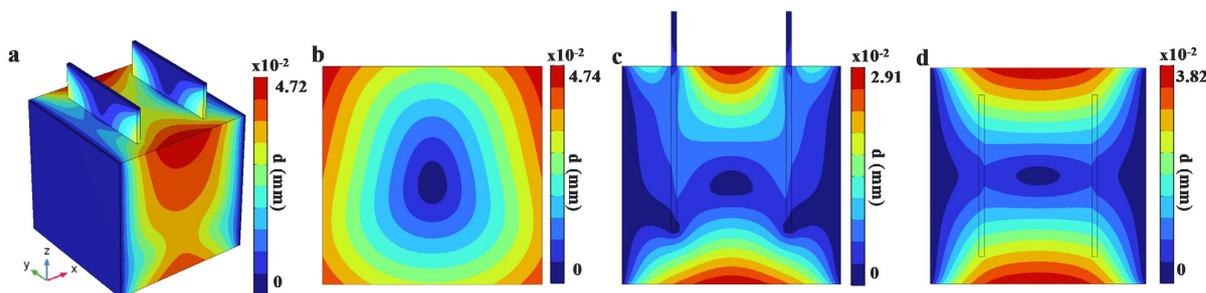
由图 14 可知, 水泥基体热膨胀, 由于在  $X = 0$  和  $X = 0.04 \text{ m}$  施加固定约束, 其膨胀被完全抑制, 从而在约束处产生显著的热应力; 而  $Y = 0 \text{ m}$ 、 $Y = 0.04 \text{ m}$ 、 $Z = 0 \text{ m}$  和  $Z = 0.04 \text{ m}$  的自由边界则允许膨胀变形。应力分布呈现强烈的不均匀性: 应力峰值出现在固定约束的棱角区域及水泥与电极片的接触界面, 并向试样中心逐渐递减, 中心区域应力最小。整体应力分布呈对称模式, 且电极片本身也表现出明显的应变。这表明约束条件对热应力的大小与分布起到了决定性作用。



**Figure 14.** Stress distributions in the specimen and its cross-sections at  $x, y, z = 75 \text{ nm}$  (a~d)  
**图 14.** 试件体及  $x, y, z = 75 \text{ nm}$  切面的应力分布图(a~d)

由图 15 可知, 热膨胀引起的位移场呈现显著的不均匀性。试样中心区域位移最小, 并向四周逐渐增

大, 其中自由边界处位移达到峰值。在 X 方向的两端固定约束处, 位移为 0; 沿 X 轴向中心位移先增大后减小。由于顶部电极片的局部约束, 底部位移整体大于顶部。这种分布特征主要源于双重约束效应: 外部固定边界直接限制了位移, 而内部中心区域在受热膨胀时受到周围材料的相互挤压, 约束了其宏观变形; 相反, 自由边界处约束最小, 热膨胀得以充分释放, 因此变形最为明显。这表明不均匀温升导致的热膨胀, 在外部分学约束与内部自约束的共同作用下, 形成了特定的位移场。



**Figure 15.** Distribution of displacement magnitude in the specimen and its cross-sections at  $x, y, z = 75 \text{ nm}$  (a~d)  
**图 15.** 试件体及  $x, y, z = 75 \text{ nm}$  切面的位移大小分布图(a~d)

本研究对 0.8 wt% 石墨烯掺杂水泥基复合材料施加 36 V 直流电压, 通过多物理场耦合模拟揭示了电-热-力传递的完整过程。石墨烯构建的三维导电网络使电流在两电极间形成高密度通道, 其分布呈现中心高、向四周对称递减的规律。产生的焦耳热在底部绝热、顶部对流的边界条件下, 形成以试样中间偏下区域为核心的高温区。由此引发的热膨胀在 X 方向两端固定约束的限制下, 导致热应力在约束棱角及电极界面处显著集中, 而位移则在自由边界处达到最大。整个过程阐明了从电流导通、非均匀产热到最终热力变形的内在机制。

#### 4. 结论

本研究基于多物理场模拟, 建立了石墨烯改性水泥基材料的参数化三维代表体积元模型和实际工况模型。主要结论如下:

1) 石墨烯掺量对复合材料性能的影响显著, 0.8 wt% 为最佳掺量。随着石墨烯掺量增加, 水泥基复合材料的等效弹性模量逐步提升, 等效电阻率逐渐下降, 等效导热系数持续上升。掺量达到约 0.8 wt% 时, 材料综合性能最优, 弹性模量提升约 12.2%, 电阻率降低约 63.4%, 与实际实验相差较小, 导热系数提高 128.5%。材料性能获得提升的同时, 避免性能提升的边际效益递减以及成本过高问题。

2) 工作电压对材料电-热-力学响应行为的影响显著, 以温度和位移变化确定 36 V 为兼顾性能与安全性的最佳工作电压。电压升高显著增强焦耳热效应, 材料温升及热应力非线性增大, 与实验相比误差小。在 36 V 安全电压下, 材料可实现有效温升, 同时内部温度分布均匀, 热位移可控, 符合国际安全电压标准, 实现了性能、均匀性、稳定性与安全性的最优平衡。

3) 多物理场耦合模拟揭示了材料电-热-力响应与相互作用的内在机制。首先, 从电场决定焦耳热源分布; 其次, 热传导与边界散热耦合形成稳定的温度场; 最后, 在机械约束下引发非均匀热应力的全过程。该耦合机制的系统揭示, 为智能电热材料的设计与工况优化提供了关键理论依据。

#### 参考文献

- [1] Li, V.C., Wang, S. and Wu, C. (2001) Tensile Strain-Hardening Behavior of Polyvinyl Alcohol Engineered Cementitious Composite (PVA-ECC). *Materials Journal*, **98**, 483-492.
- [2] Balandin, A.A., Ghosh, S., Bao, W., Calizo, I., Teweldebrhan, D., Miao, F., *et al.* (2008) Superior Thermal Conductivity

- of Single-Layer Graphene. *Nano Letters*, **8**, 902-907. <https://doi.org/10.1021/nl0731872>
- [3] Lee, C., Wei, X., Kysar, J.W. and Hone, J. (2008) Measurement of the Elastic Properties and Intrinsic Strength of Monolayer Graphene. *Science*, **321**, 385-388. <https://doi.org/10.1126/science.1157996>
- [4] Klemenč, A., Pastewka, L., Balakrishna, S.G., Caron, A., Bennewitz, R. and Moseler, M. (2014) Atomic Scale Mechanisms of Friction Reduction and Wear Protection by Graphene. *Nano Letters*, **14**, 7145-7152. <https://doi.org/10.1021/nl5037403>
- [5] 贾兴文, 张新, 马冬, 等. 导电混凝土的导电性能及影响因素研究进展[J]. 材料导报, 2017, 31(21): 90-97.
- [6] Novoselov, K.S., Geim, A.K., Morozov, S.V., Jiang, D., Zhang, Y., Dubonos, S.V., *et al.* (2004) Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. *Science*, **306**, 666-669. <https://doi.org/10.1126/science.1102896>
- [7] Novoselov, K.S., Fal'ko, V.I., Colombo, L., Gellert, P.R., Schwab, M.G. and Kim, K. (2012) A Roadmap for Graphene. *Nature*, **490**, 192-200. <https://doi.org/10.1038/nature11458>
- [8] Cao, Z., Sun, J., Meng, L., Zhang, K., Zhao, J., Huang, Z., *et al.* (2023) Progress in Densification and Toughening of High Entropy Carbide Ceramics. *Journal of Materials Science & Technology*, **161**, 10-43. <https://doi.org/10.1016/j.jmst.2023.03.034>
- [9] Ham, Y., Kim, C., Shin, D., Kim, I., Kang, K., Jung, Y., *et al.* (2023) All-Graphene Quantum Dot-Derived Battery: Regulating Redox Activity through Localized Subdomains. *Small*, **19**, Article ID: 2303432. <https://doi.org/10.1002/smll.202303432>
- [10] Mayorov, A.S., Gorbachev, R.V., Morozov, S.V., Britnell, L., Jalil, R., Ponomarenko, L.A., *et al.* (2011) Micrometer-scale Ballistic Transport in Encapsulated Graphene at Room Temperature. *Nano Letters*, **11**, 2396-2399. <https://doi.org/10.1021/nl200758b>
- [11] 李泽鑫. 石墨烯改性水泥基材料力学及变形性能研究[D]: [硕士学位论文]. 杭州: 浙江工业大学, 2019.
- [12] Ho, V.D., Ng, C., Ozbakkaloglu, T., Goodwin, A., McGuckin, C., Karunagaran, R.U., *et al.* (2020) Influence of Pristine Graphene Particle Sizes on Physicochemical, Microstructural and Mechanical Properties of Portland Cement Mortars. *Construction and Building Materials*, **264**, Article ID: 120188. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2020.120188>
- [13] Jin, M., Li, W., Ma, Y., Zeng, H., Huang, M., Lu, C., *et al.* (2023) Investigation on the Electrical Conductivity of Graphene/Cement Composites by Alternating Current Method. *Materials*, **16**, Article 1436. <https://doi.org/10.3390/ma16041436>
- [14] 张雪梅, 刘荣桂, 戴丽, 等. 石墨烯改性混凝土的制备及其力学性能和抗冻性能研究[J]. 功能材料, 2023, 54(4): 4087-4092.
- [15] 陈敏. 掺石墨烯复相导电水泥基材料电-热和机敏性研究[D]: [硕士学位论文]. 南京: 南京航空航天大学, 2018.
- [16] 李楠. 石墨烯增强水泥基复合材料机敏特性与热管理研究[D]: [硕士学位论文]. 沈阳: 沈阳工业大学, 2024.
- [17] 傅孝良, 蒲云东, 赵磊, 等. 石墨烯改性水泥净浆的电热性能有限元分析[J]. 科技创新与应用, 2024, 14(21): 65-69.
- [18] 应宗权, 杜成斌. 考虑界面影响的混凝土弹性模量的数值预测[J]. 工程力学, 2008(8): 92-96.
- [19] 姜海峰. 自感知碳纳米管水泥基复合材料及其在交通探测中的应用[D]: [硕士学位论文]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学, 2012.
- [20] 张伟平, 童菲, 邢益善, 等. 混凝土导热系数的试验研究与预测模型[J]. 建筑材料学报, 2015, 18(2): 183-189.
- [21] 卫琳. 碳纳米材料填充水泥基复合材料力学及电学特性研究[D]: [博士学位论文]. 沈阳: 沈阳工业大学, 2024.
- [22] 王海红. 碳纤维石墨电热混凝土热学性能研究[D]: [硕士学位论文]. 广州: 广州大学, 2018.
- [23] 赵静威. 石墨烯与碳纳米管增强水泥砂浆的力学与电学性能研究[D]: [硕士学位论文]. 沈阳: 沈阳工业大学, 2024.
- [24] Gomis, J., Galao, O., Gomis, V., Zornoza, E. and Garcés, P. (2015) Self-Heating and Deicing Conductive Cement. Experimental Study and Modeling. *Construction and Building Materials*, **75**, 442-449. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2014.11.042>