基于分子动力学的丝网印刷柔性传感器电极导电性 机理研究

潘云霄¹,李艳^{1*},王云燕¹,蔡子木¹,彭拓凯²,许建林¹,任铮¹

(1.北京印刷学院 a.数字化印刷装备北京市重点实验室 b.印刷装备北京市高等学校工程研究中心 北京 102600; 2.北京化工大学 软物质科学与工程高精尖创新中心,北京 100029)

摘要:目的 研究提高丝网印刷柔性传感器电极的导电性,为提升柔性传感器的电学性能提供参考依据。 方法 首先采用分子动力学(Molecular Dynamic, MD)模拟方法,建立在Wenzel模型下导电银浆团簇 在不同粗糙因子下的对苯二甲酸乙二醇酯(Polyethylene Terephthalate, PET)表面铺展的分子动力学模 型,其次分别计算各体系下的结合能,用以表征不同体系下 PET 表面对导电银浆团簇结合能力,接下 来通过丝网印刷实验的方法探究银浆与不同粗糙因子 PET 的结合能力对传感器电极的导电性的影响。 结果 仿真结果表明,导电银浆团簇在不同粗糙因子的 PET表面的铺展过程中会陷入粗糙表面的凹陷处, 且导电银浆与基材的结合能随着 PET 粗糙因子的增加而增加。实验结果表明,使用不同粗糙因子的 PET 作为承印物能显著提升电极的导电性。相比于未处理的 PET,随着粗糙因子的增加,导电线条的电导率 逐渐升高,电阻率逐渐降低,方块电阻逐渐降低。电导率最大提升了 77%,电阻率最大下降了 43%,方 块电阻最大下降了 38%。结论 导电银浆在粗糙表面铺展的过程中会渗入基材的凹陷处,增加了吸附点 位,使得银浆与基材的结合更加紧密,银颗粒之间距离变小导电性增强。因此为了增加导电线条的导电 性可以适当增加基材的粗糙度。

关键词: 丝网印刷; 柔性压力传感器; 分子动力学; 粗糙因子; 结合能; 导电性 中图分类号: TS802.3 文献标志码: A 文章编号: 1001-3563(2024)01-0054-08 DOI: 10.19554/j.cnki.1001-3563.2024.01.007

Mechanism of Electrode Conductivity in Screen Printing Flexible Sensors Based on Molecular Dynamics

PAN Yunxiao¹, LI Yan^{1*}, WANG Yunyan¹, CAI Zimu¹, PENG Tuokai², XU Jianlin¹, REN Zheng¹

(1. a. Beijing Key Laboratory of Digitization Printing Equipment, b. Engineering Research Center of Printing Equipment of Beijing Universities, Beijing Institute of Graphic Communication, Beijing 102600, China; 2. Beijing Advanced Innovation Center for Soft Matter Science and Engineering, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China)

ABSTRACT: The work aims to improve the conductivity of the electrode in the screen printing flexible sensor, and provide a reference for improving the electrical properties of the flexible sensor. Firstly, the molecular dynamic (MD) simulation method was used to establish the molecular dynamics model of conductive silver paste spreading on the surface of polyethylene terephthalate (PET) under different roughness factors in Wenzel model. Secondly, the binding

收稿日期: 2023-08-28

基金项目:国家新闻出版署智能与绿色柔版印刷重点实验室招标课题(ZBKT202006);超弹性现象对柔版印刷质量影响 研究(ZBKT202103)

energy of each system was calculated to characterize the binding ability of PET surface to conductive silver paste clusters in different systems. Then, the effect of the binding ability of silver paste and PET with different roughness factors on the conductivity of sensor electrode was explored by screen printing experiment. The simulation results showed that the conductive silver paste fell into the depression of rough surface during the spreading on PET surface with different roughness factors, and the binding energy between conductive silver paste and substrate increased with the increase of PET roughness factors. According to the experimental results, the conductivity of the electrode was significantly improved by PET with different roughness factors as the substrate. Compared with untreated PET, with the increase of roughness factor, the conductivity of conductive lines gradually increased by 77%, the resistivity gradually decreased by 43%, and the block resistance gradually decreased by 38%. Conductive silver paste will penetrate into the depression of the substrate during the spreading on rough surface, which increases the adsorption point, making the combination of silver paste and substrate closer, narrowing the distance between silver particles and enhancing the conductivity. Therefore, in order to increase the conductivity of the conductive lines, the roughness of the substrate can be appropriately increased.

KEY WORDS: screen printing; flexible pressure sensor; nolecular dynamics; roughness factor; binding energy; conductivity

柔性电子技术是建立在可弯曲或可延伸基材上 的新兴的电子技术,产生了柔性通信、柔性显示、柔 性医疗、柔性传感等新的应用,要求产品在弯曲,压 缩或拉伸状态下仍能正常工作,有着非常广阔的应用 前景,受到学术界和产业界的广泛关注^[1-5]。随着柔 性电子技术的发展,柔性印刷电子技术凭借其制造成 本低、效率高等优点在大面积柔性化等特色电子产品 应用领域有着无法取代的优势。而丝网印刷凭借其设 备简便, 对油墨及承印物适应性强、墨层厚实、油墨 自发性运动少且工艺成熟等优势在柔性印刷电子领 域有着广泛的应用[6-10]。由于传统的半导体和金属基 压力传感器灵敏度低且抗变形能力有限等特点,难以 应用于柔性接触或者可穿戴设备上[11]。于是如何能够 通过丝网印刷的方式制备出导电性好,分辨率高的柔 性传感器就成了印刷电子领域的一个热门问题。刘世 朴等^[12]通过理论研究和 Fluent 仿真研究了丝网印刷 导电油墨转移机理,并得出了可以适当增加楔形区动 压可以提高印刷质量的结论。杨宁等[13]使用高导电性 的石墨烯对 CM800 纤维进行改性,并以改性的纤维 作为柔性传感器的基底,得到的传感器的变化速率和 灵敏度都得到了提高。Janczak 等^[14]使用含有石墨烯 和碳纳米管的高导电性复合材料,采用丝网印刷工艺 制造的压力传感器在响应速度上远超使用其他工艺的 同类传感器,并且在电阻和压力之间呈现几乎线性的对 数关系。Khan 等^[15]利用丝网印刷技术,通过使用不同 质量比的多壁碳纳米管混合在聚偏二氟乙烯-三氟乙烯 中作为功能层材料印刷获得传感阵列;通过优化渗滤阈 值得到更好的灵敏度,且得出了在较低渗透

比下的高电导率具有重要意义的结论。Sang 等^[16]利 用了海绵的多孔骨架结构以及石墨烯/Mxene 的高导 电性的复合材料制备了高灵敏度、高稳定性的一体化 传感器。以上这些研究均集中在宏观工艺层面以及材 料上,对导电浆料与承印物结合的微观层面机理研究 以及工艺参数对导电性的影响鲜有涉及。

导电银浆凭借其良好的导电性、经济性、适应性在

众多材料中脱颖而出,其主要成分为质量分数为 60% 的纳米银颗粒和质量分数为 40%的保护剂,其中银颗粒 是主要的导电物质。保护剂是主要的成膜物质,是导电 线条的主要结构物质。导电银浆通过与基材表面的吸附 作用在基材表面上形成导电线条。因此导电银浆与基材 吸附的强弱势必会影响导电线条导电性。

综上所述,利用分子动力学和丝网印刷实验的方法在微观层面上对导电银浆在基材表面的吸附的过程进行研究。首先对导电银浆在基材上的铺展这一过程利用商业软件 Materials Studio 建立导电银浆团簇以及不同粗糙因子的 PET 表面的模型,利用动力学平衡模拟导电银浆在基材表面的铺展行为,通过观察银浆团簇的运动轨迹以及计算体系的结合能表征银浆与基材的结合能力的强弱。然后通过在提前处理好的不同粗糙因子的 PET 表面进行印刷实验,测量基材表面的廓线,计算其粗糙因子,最后测量基材上导电线条的电导率、电阻率和方块电阻,验证基材表面粗糙因子与其上的导电线条电学性能的联系。

1 模型搭建及动力学模拟

1.1 导电银浆的模型建立

分子动力学软件 Materials Studio 由北京化工大学 软物质科学与工程高精尖创新中心提供,并进行计算。 首先在 Materials Studio 中导入 Ag 的晶胞利用 build nanocluster 功能,建立半径为 6 Å 的银团簇。接下来建 立丙烯酸的单体并利用 Forcite 模块的 Geometry Optimization 功能对丙烯酸单体分子进行 5 000 步的结构优 化得到稳定的聚丙烯酸单体分子。然后利用 Amorphous Cell Tools 工具将 Ag 团簇以及聚丙烯酸单体按照质量比 为 3:2 随机放入一个盒子中,密度设置为 2.375 g/cm³, 然后利用 build nanocluster 功能构建 30 Å×30 Å×30 Å 的导 电银浆模型,并进行 50 000 步的结构优化。弛豫过程的 能量变化如图 1a 所示,得到的导电银浆模型如图 1b 所示。





b 弛豫后银浆团簇分子模型

图 1 银浆团簇弛豫过程 Fig.1 Relaxation process of silver paste

r

r

1.2 不同表面粗糙度基材模型的建立

在微观层面上,任何基材都不会是理想的光滑平 面,为构建不同形貌的承印物模型,需要对粗糙度进 行量化。采用 Wenzel 模型对基材的粗糙度进行描述, Wenzel 模型示意图如图 2 所示。



图 2 粗糙表面模型 Fig.2 Model of rough surface

图 2 中, *a* 为凸起部分边长, *b* 为凹陷部分边长, *c* 为宽度, *h* 为凸起高度。

由 Wenzel 模型的定义可知, 粗糙度因子 r 的计 算见式 (1)。

$$=\frac{A_{\rm sl(true)}}{A_{\rm sl(apparent)}}\tag{1}$$

式中:r为粗糙度;A_{sl(true)}为实际表面积;A_{sl(apparent)}为几何投影面积。

由示意图可知实际表面积的计算见式(2)。

$$A_{\rm sl(true)} = (a'+b')c + nch$$
⁽²⁾

式中: *a*'、*b*'分别为凸起和凹陷部分总长度; *n* 为凸起部分侧面总数量。

几何投影面积的计算见式(3)。

$$A_{\rm sl(apparent)} = (a'+b')c \tag{3}$$

将式(2)、式(3)带入式(1)得表面粗糙度公 式,见式(4)。

$$=1+\frac{nh}{a'+b'}\tag{4}$$

根据设置的不同粗糙度因子的基材参数(如 表1所示)建立的不同粗糙度的表面模型,如图 3所示。

		•		1 8	
基材名称	凸起部分边长 a/Å	凹陷部分边长 b/Å	凸起侧面数量 n	凸起高度 h/Å	粗糙度因子 r
表面 0	120	0	0	0	1
表面 1	12	12	9	5	1.37
表面 2	12	12	9	10	1.75
表面 3	6	6	19	5	1.79
表面 4	5	5	23	5	1.96
表面 5	6	6	19	10	2.58

表 1 不同表面形貌的承印物参数 Tab.1 Substrate parameters under different surface morphologies



e 表面4

f 表面5

图 3 不同粗糙度表面模型 Fig.3 Surface models with different roughness levels

所建立的不同粗糙表面的基材模型的长度分别为: OA 方向 100 Å, OB 方向 120 Å, 真空层高度 150 Å。

1.3 模拟细节设置

利用 close contact 工具将前文建立的银浆团簇放 置到前文所建立的不同粗糙度基材表面,并进行几何 优化,优化后的体系模型如图4所示。



图 4 铺展体系模型 Fig.4 Spreading system model

由于重点研究体系为导电银浆在基材表面的铺 展行为,可忽略承印物分子的运动,故将承印物表面 分子全部设置为固定。由于在铺展过程中体系中分子 的个数、体积以及温度是不变的,因此在模拟过程中, 采用正则(NVT)系综。由于 COMPASS 力场能够模 拟有机和无机小分子、高分子,一些金属离子、金属 氧化物与金属,故银浆铺展体系选用 COMPASS 力 场。本次印刷实验全部在 25 ℃之下完成, 故模拟温 度设置为 298 K,时间步设置为 1 fs,总模拟时长设 置为 500 ps, 温度控制采用 Berensen 控温法, 范德华 力的截断半径设置为 20 Å, 防止因周期性边界条件 影响铺展结果。

1.4 结合能的计算模型

导电银浆与基材的结合能定义为铺展完成后导 电银浆-基材系统的总能量与导电银浆能量和基材能 量的和的差值,如式(5)所示。

$$E = E_{(a, b)} - (E_a + E_b)$$
(5)

式中: E 为结合能; E_(a,b)为银浆-基材系统的总 能量; E_a和 E_b分别为银浆的能量以及基材的能量。 结合能为正值说明物质间呈相互排斥作用,结合能为

负值说明物质间呈相互结合状态,且负值的绝对值越 大结合作用越强。利用 Materials Studio 中 Forcite 模 块中的 Energy 任务可以分别计算出上述 3 种系统的

计算结果及讨论

经过分子动力学模拟之后的体系模型如图 5 所 示,体系能量变化图如图6所示。



图 5 不同粗糙度基材分子动力学模拟结果 Fig.5 Molecular dynamics simulation results of substrates with different roughness





由图 5 可以明显看出, 各个银浆填充入基材凹陷 处,符合 Wenzel 模型的描述。同时由图 6 可以看出 各体系在 500 ps 时达到了动力学平衡,说明各体系此 时已经达到了稳定状态。银浆团簇与基材的接触界面 由正方形变为圆形,同时自由液面也演变为球面,这 与宏观中的现象是一致的。这是由于在 NVT 系综 (Ensemble)下且外界不向体系做功的情况下,任何 体系都是向着吉布斯自由能(G)减小的方向进行,

即体系为了达到平衡会向着能量减小方向进行^[17-21]。 由于液体内部分子受到其他周围液体分子的作用力 远大于液体表面分子受到外界的作用力,受力示意 图如图 7 所示,而所有表面层内部分子所受合力使 液体有向内部收缩进而缩小表面积的趋势,液体表 面收到的沿着液面切线方向的力称为表面张力,通常 用 y 表示。



图 7 液滴内部分子受力示意图 Fig.7 Schematic diagram of internal molecular forces on droplets

由于液体表面有向内收缩的趋势,若形成新的表面,则必须对该体系做功,因此若液体内部的分子移动到表面层,则需要外界对其做功,形成新表面过程中所消耗的功就等于体系自由能的增量。又因为这部分增加的自由能是由于表面积增加造成的,所以称此能力为表面自由能,通常用 *G* 表示,并有式(6)成立。

$$G = \gamma \int_0^A \mathrm{d}A = \gamma \cdot A \tag{6}$$

其中: G 为吉布斯自由能; y 为表面张力; A 为 表面积。

对于一个特定的液体体系,当体系处于平衡状态时,其所具有的能量最小,将式(6)微分得到式(7)。

$$\mathrm{d}G = \gamma \mathrm{d}A + A\mathrm{d}\gamma \tag{7}$$

由式(7)可以得出结论:当表面张力一定时, 只有表面积缩小才有表面自由能减小,因此液体缩小 表面积是个自发的过程;当表面积一定时,只有表面 张力减小才有表面自由能减小,因此液体表面张力减 小是个自发的过程,固体与液体物质产生的吸附现 象,就是因为吸附物体之后可以减小表面张力。

计算各个体系下的结合能结果见表 2。

表 2	不同系统下的结合能
Tab.2 Binding	energy under different systems

基材名称	粗糙因子 r	结合能/(kJ·mol ⁻¹)
表面 0	1	-3 248.48
表面 1	1.37	-3 391.48
表面 2	1.75	-3 613.79
表面 3	1.79	-4 390.78
表面 4	1.96	-5 802.84
表面 5	2.58	-7 948.03

根据表 2 可以明显看出, 各个体系的结合能均为 负值, 说明导电银浆和不同粗糙度的基材均呈现相互 吸引的性质, 且同一种银浆团簇在不同粗糙因子表面 的结合能的绝对值随着粗糙因子的变大也随之变大。 说明导电银浆在基材表面的结合能力随着粗糙因子 的变大而增强, 那么可以得出推论:随着结合能力的 增强, 银颗粒在基材表面的聚集也会更加致密, 导电 性也就会越强。故若是想要得到的导电性以及稳定性 较强的银浆线条, 需要适当增加基材的粗糙度以达到 增加导电性的目的。

3 印刷实验

3.1 实验方案

使用与上述仿真中同样组分含量的导电银浆作为印刷的油墨,分别使用未经处理的 0.2 mm 的 PET,以及分别用 220、400、800、1 000、1 200、1 500 目的砂纸处理厚度为 0.2 mm 的 PET 作为印刷基材。印刷设备使用实验室自研的丝网印刷机印制(如图 8 所示)压力传感器的电极。为了保证粗糙基材表面均匀且方向一致,将砂纸与丝网印刷机刮墨刀结合(如图 9 所示),使得打磨压力以及方向一致,并使用激光共聚焦显微镜测量样品廓线。干燥设备使用恒温干燥箱(如图 10 所示)在 70 ℃条件下干燥 30 min。在(26±2)℃的温度、(55±5)%的湿度下使用四探针电阻测试仪,用来测试电极的电导率、电阻率以及方块电阻。



图 8 压力传感器电极 Fig.8 Pressure sensor electrode



图 9 丝印机处理基材 Fig.9 Substrate polished by screen printing machine



图 10 电热恒温干燥箱 Fig.10 Electric constant temperature drying oven

3.2 实验结果及分析

印制的压力传感器电极样张如图 11 所示,由激 光共聚焦显微镜测得的 PET 基材表面的数据点绘制 的廓线如图 12 所示。

利用 Matlab 计算出廓线的总长度作为实际接触 表面的长度,记为 l_{true},而廓线在 x 方向上的投影长 度记为 l_{apparent},则粗糙因子 r 可以表示为 r=l_{true}/l_{apparent}。 分别测试每组样品上每个电极的电导率、电阻率以及 方阻,并取平均值,测试结果如表 3 所示。



图 11 压力传感器电极样张 Fig.11 Pressure sensor electrode sample

由表 3 可以明显看出,与未经处理的基材表面相 比,经过不同粗糙度砂纸处理过的基材上的导电线条 均发生了电阻率降低,电导率升高,方块电阻降低的 现象。其中以用 1 500 目砂纸处理过的基材效果最显 著,电阻率下降了 43.0%,电导率提高了 77%,方块 电阻下降了 38.0%。说明了适当增加粗糙度有助于提 升导电线条的导电性。

将表 3 中的粗糙因子作为横坐标,电阻率、电导 率、方块电阻分别作为纵坐标绘制电学参数随粗糙因 子变化图,如图 13 所示。





样品编号	砂纸目数	粗糙因子	电阻率/(mΩ·cm)	电导率/(S·cm ⁻¹)	方块电阻/(mΩ·□ ⁻¹
0	220	1.012	3.41	306.36	123.42
1	400	1.143	2.53	409.50	95.14
2	800	1.117	3.23	317.18	110.75
3	1 000	1.104	3.36	307.69	112.20
4	1 200	1.132	2.63	393.2	99
5	1 500	1.174	2.35	447.74	87.64
6	0	1.002	4.12	251.91	141.46





电学性能随粗糙因子变化 图 13 Fig.13 Changes of electrical properties with roughness factor

由图 13 可以看出,随着粗糙因子的增加,电导 率逐渐增大,电阻率逐渐减小,方块电阻在逐渐减小。 这些电学参数的变化表示了导电线条的导电性在随 着基材的粗糙因子的增加而变强。结合上文中的分子 动力学模拟,在丝网印刷导电银浆铺展过程中油墨会 渗透进承印物的凹陷处,一方面增加了承印物与银浆 的吸附点位, 增大了结合能, 致使导电银浆中的银颗 粒之间结合得更加紧密,致使导电能力相较于未经处 理的基材上的导电线条能力更强, 且粗糙因子越大的 导电线条的导电能力就更强。另一方面, 渗入凹陷处 的银浆会使导电线条的厚度相较于未经处理的基材 上的线条厚度有所增加,在线条宽度同样的条件下, 线条的截面积会变大。根据电阻定律,在电阻率和长 度不变的情况下,导电线条的电阻和截面积成反比, 因此导电线条的导电性能会有提升,且粗糙因子越大 导电性越强。

4 结语

在使用丝网印刷的方式制备柔性压力传感器电 极的过程中,使用导电银浆作为导电层的材料,使用 不同粗糙因子的 PET 薄膜, 其目的是尽可能增加导 电线条的电学性能。文中通过采用分子动力学方法建 立导电银浆在不同粗糙度表面铺展的模型,揭示了导 电银浆在不同粗糙度基材上的铺展机理,并计算出了

铺展过程中两相的结合能,明确了导电性与导电银浆 和基材之间的结合强弱对导电性的影响。研究得到的 结论如下:

1)导电银浆在粗糙基材表面上的铺展符合 Wenzel 模型,导电银浆会充满基材的凹陷处,增加 了银浆与基材吸附点位,从而使两相的结合能增加。

2)在不同粗糙因子基材上的导电线条,随着粗糙 因子增加, 电导率增大, 电阻率减小, 方块电阻减小。

3)在经过处理的基材上印制出的导电线条导电 能力增加的原因一方面在于增加了吸附点位使得结 合能增大,从而使得导电银浆中的纳米银颗粒与基材 表面结合得更加致密,颗粒之间距离变小,电子的移 动更加顺畅,从而使得线条电学性能变强,验证了由 仿真得出的推论。另一方面由于粗糙表面的存在,使 得导电线条的厚度增加,在其他条件不变的情况下, 线条的电阻变小导致导电性增强。

参考文献:

- [1] 尹周平, 黄永安. 柔性电子制造: 材料、器件与工艺 [M]. 北京: 科学出版社, 2016. YIN Z P, HUANG Y A. Micro Nano Manufacturing[M]. Beijing: Science Press, 2016.
- [2] 王俊珺,李涛,李雄鹰,等.液态镓在石墨烯表面的

润湿性及形貌特征[J]. 物理学报, 2018, 67(14): 305-313.

WANG J J, LI T, LI X Y, et al. Wettability and Morphology of Liquid Gallium on Graphene Surface[J]. Acta Physical Sinica, 2018, 67(14): 305-313.

- [3] JANG J, KANG, HIMAMSHU C, et al. Fully Inkjet-PRINTED Transparent Oxide Thin FilmTransistors Using a Fugitive Wettability Switch[J]. Advanced Electronic Materials, 2015, 1(7): 1500086-1500093.
- [4] WÜNSCHER S, ABBEL R, PERELAER J, et al. Progress of Alternative Sintering Approaches of Inkjet-Printed Metal Inks and Their Application for Manufacturing of Flexible Electronic Devices[J]. Journal of Materials Chemistry C, 2014, 2(48): 10232-10261.
- [5] ZHANG Z, GUO X, TANG H, et al. Unidirectional Self-Driving Liquid Droplet Transport on a Monolayer Graphene-Covered Textured Substrate[J]. ACS Appl Mater Interfaces, 2019, 11(31): 28562-28570.
- [6] 崔铮. 印刷电子学: 材料、技术及其应用[M]. 北京: 高等教育出版社, 2012.
 CUI Z. Printed Electronics[M]. Beijing: Higher Education Press, 2012.
- [7] SOWADE E, KANG H, MITRA K, et al. News from the Editors of Journal of Materials Chemistry A, B & C.[J]. Journal of Materials Chemistry C, 2015, 3(45): 11815-11816.
- [8] RIM Y S, BAE S H, CHEN H J, et al. Recent Progress in Materials and Devices Toward Printable and Flexible Sensors[J]. Advanced Materials, 2016, 28(22): 4415-4440.
- [9] YANG S, KIM W, CHO M. Molecular Dynamics Study on the Coalescence Kinetics and Mechanical Behavior of Nanoporous Structure Formed by Thermal Sintering of Cu Nanoparticles[J]. International Journal of Engineering Science, 2018, 123(9): 1-19.
- [10] LIN D, CAI P, PEACOCK C L, et al. Towards a Better Understanding of the Aggregation Mechanisms of Iron (Hydr)Oxide Nanoparticles Interacting with Extracellular Polymeric Substances: Role of pH and Electrolyte Solution[J]. The Science of the Total Environment, 2018, 645: 372-379.
- [11] 苏倩,刘学婧,张军诗,等. 柔性力敏传感器发展现状[J]. 轻工机械, 2023, 41(4): 1-13.
 SU Q, LIU X J, ZHANG J S, et al. Development Status of Flexible Force Sensor[J]. Light Industry Machinery, 2023, 41(4): 1-13.
- [12] 刘世朴,李艳,田野,等. 网版印刷导电油墨转移机

理及仿真研究[J]. 机械工程学报, 2021, 57(5): 231-241.

LIU S P, LI Y, TIAN Y, et al. Screen Printing Conductive Ink Transfer Mechanism and Simulation Research[J]. Journal of Mechanical Engineering, 2021, 57(5): 231-241.

- [13] 杨宁,魏保良,田明伟,等. 基于 CM800 针织物的石 墨烯应变传感器性能研究[J]. 毛纺科技, 2022, 50(3): 22-29.
 YANG N, WEI B L, TIAN M W, et al. Performance Research of Graphene Strain Sensor Based on CM800 Knitted Fabric[J]. Wool Textile Journal, 2022, 50(3): 22-29.
- [14] JANCZAK D, SŁOMA M, WRÓBLEWSKI G, et al. Screen-Printed Resistive Pressure Sensors Containing Graphene Nanoplatelets and Carbon Nanotubes[J]. Sensors, 2014, 14(9): 17304-17312.
- [15] KHAN S, DANG W T, LORENZELLI L, et al. Flexible Pressure Sensors Based on Screen Printed P(VDF-TrFE) and P(VDF-TrFE)/MWCNTS[J]. IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing, 2015, 28(4): 1.
- [16] SANG S B, JING Z, CHENG Y Q, et al. Graphene and MXene-based Sponge Pressure Sensor Array for Rectal Model Pressure Detection[J]. Macromolecular Materials and Engineering, 2021, 306(10): 12-21.
- [17] 黄海洋,李艳,薛倩.导电银浆中纳米银团簇的分子 动力学研究[J].包装工程,2020,41(19):122-128.
 HUANG H Y, LI Y, XUE Q. Molecular Dynamics of Nano Silver Clusters in Conductive Silver Paste[J].
 Packaging Engineering, 2020, 41(19): 122-128.
- [18] PIKE G E, SEAGER C H. Percolation and Conductivity: a Computer Study. I[J]. Phy Rev, 1974, 10(4): 1421
- [19] DING L F, DAVIDCHACK R, PAN J Z. A Molecular Dynamics Study of Sintering between Nanoparticles[J]. Computational Materials Science, 2009, 45(2): 247-256.
- [20] 潘小龙, 王豪, 陈向荣, 等. 高压下金属铌熔化曲线的分子动力学模拟[J]. 原子与分子物理学报, 2021, 38(2): 111-116.
 PAN X L, WANG H, CHEN X R, et al. Molecular Dynamics Simulations of Melting Curves of Metal Nb under High Pressure[J]. Journal of Atomic and Molecular Physics, 2021, 38(2): 111-116.
- [21] LIU X C, WEN X D, HOFFMANN R. Surface Activation of Transition Metal Nanoparticles for Heterogeneous Catalysis: What we can Learn from Molecular Dynamics[J]. ACS Catalysis, 2018, 8(4): 3365-3375.