

DOI:10.14044/j.1674-1757.pcrpc.2024.01.012

基于分子动力学的聚丙烯电热应力老化特性分析

高煦轲, 常曦文, 仝殿杰, 王璁, 屠幼萍
(华北电力大学高电压与电磁兼容实验室, 北京 102206)

摘要: 高压直流输电(HVDC)工程中广泛应用的聚丙烯(PP)薄膜电容器,其内部高温和高场强是PP老化的主要原因。基于分子动力学仿真方法,从分子层面研究了PP在电热应力下的老化过程。首先建立PP和含羰基PP分子模型,基于反应力场分别模拟了热、电应力作用下PP裂解反应,分析了主要产物形成过程;然后基于COMPASS力场分析热应力下PP力学和绝缘性能变化规律。结果表明:PP裂解反应中C—H键首先断裂,然后是C—C键的断裂并形成羰基,在此过程中热应力对于PP的电热老化影响更显著;温度在450 K以下时,PP力学参数基本不变,当温度达到600 K时,PP力学参数显著变化,稳定性下降;羰基影响PP老化过程中的力学和绝缘性能变化,含羰基PP能隙下降28.21%,在300 K、450 K和600 K时弹性模量分别增加15.3%、32.85%和27.08%。
关键词: 聚丙烯; 绝缘性能; 分子动力学; COMPASS力场; 反应力场; 老化

Analysis of Electrothermal Stress Aging Characteristics of Polypropylene Based on Molecular Dynamics

GAO Xuke, CHANG Xiwen, TONG Dianjie, WANG Cong, TU Youping

(Beijing Key Laboratory of High Voltage and Electromagnetic Compatibility, North China Electric Power University, Beijing 102206, China)

Abstract: For polypropylene (PP) film capacitor, which is used widely in high-voltage direct current (HVDC) engineering, its internal high temperature and high field strength are the main causes of PP aging. Based on simulation method of dynamics, the aging process of PP under electrothermal stress is analyzed at molecular level. Firstly, molecular models of PP and PP containing carbonyl groups are set up. Based on the reaction force field, the pyrolysis reaction of PP under thermal and electrical stress is simulated and the main product formation process is analyzed; Then, based on the COMPASS force field, the variation of mechanical and insulation performance of PP under thermal stress is analyzed. The results show that the C—H bond firstly breaks during the PP cracking reaction, followed by the C—C bond breaking and the formation of carbonyl groups. During this process, thermal stress has a more significant effect on the electrothermal aging of PP; When the temperature is below 450 K, the mechanical parameters of PP remain basically unchanged. While, when the temperature reaches 600 K, the mechanical parameters of PP change significantly and the stability decreases; Carbonyl groups affect variation of mechanical and insulation properties of PP during aging. The energy gap of PP containing carbonyl groups decreases by 28.21%, and the elastic modulus increases by 15.3%, 32.85%, and 27.08% at 300 K, 450 K, and 600 K, respectively.

Keywords: polypropylene; insulation performance; molecular dynamics; COMPASS force field; reaction force field; aging

0 引言

等规聚丙烯(isotactic polypropylene, i-PP)薄膜

电容器因其优越的绝缘性能、良好的介电稳定性以及无需化学交联、可循环使用的制备特性,在高压直流输电(high voltage direct current, HVDC)工程中

收稿日期:2023-08-31

基金项目:国家重点研发计划(2021YFB2401503)。

得到广泛应用^[1-2]。在实际使用中聚丙烯会受到工作环境持续高场强与高温的影响发生老化,导致其击穿和介电性能下降,进而造成严重的电容器设备故障^[3],所以掌握聚丙烯在电热效应长期作用下的老化特性,对提升聚丙烯的长期可靠性具有指导意义。

目前国内外学者对聚丙烯薄膜老化后性能变化规律与老化机制进行了一定的研究。文献[4]发现电热应力老化后聚丙烯薄膜的结构性能以及击穿场强有着一定程度的降低;文献[5]采用基于表面分析的方法,发现老化后聚丙烯薄膜靠近电极侧的老化现象主要由自愈失败造成,远离电极侧的老化主要由电化学腐蚀造成,且层间的空气水分对两种老化机制均有加强作用;文献[6]对聚丙烯薄膜进行了24 h的热老化,发现老化后聚丙烯洁净度变化不规则,提出基于 β 晶断裂反应的老化机理;文献[7]使用太赫兹光谱探究聚丙烯薄膜老化原理,发现随着老化时间的增长,聚丙烯薄膜极性自由基含量增加,导致其介质损耗升高,击穿场强降低;文献[8]对BOPP薄膜进行了1 000 h的真空环境下热老化,发现老化后薄膜出现重结晶现象,导致微孔缺陷中自由体积增大,较低场强击穿概率上升。基于宏观试验的老化机制研究,只能通过试验结果结合理论推理得出结论,无法从分子水平上对聚丙烯的老化机制进行诠释。

随着近年来量子力学理论的逐步完善和计算机技术的不断发展,基于各类力场的分子动力学模拟方法凭借其准确性、高效性和实用性,在分析化学、材料科学、分子生物学等诸多领域得到越来越广泛的应用^[9-11]。文献[12]在2 000~3 000 K温度范围内对聚乙烯材料进行了高温裂解分子动力学仿真,所得产物与试验结果相吻合;文献[13]基于反应力场(reactive force field, ReaxFF)模拟正十二烷醇的热分解特性,揭示正十二烷醇反应动力学的微观机理;文献[14]使用 ReaxFF 模拟研究了4种CL-20晶型的热分解初始过程,从初始构象转变和热分解动力学性质两方面刻画了不同晶型的CL-20热响应的动态过程。这些成功应用为使用分子动力学模拟方法研究聚丙烯在电热双应力下老化特性奠定了基础。

为从分子层面进一步厘清聚丙烯薄膜老化特性,本文建立了聚丙烯和含羰基聚丙烯的最优分子模型,基于 ReaxFF 计算聚丙烯分子分别在电热应力下的微观动态反应以及主要产物形成过程,对比了两种应力对聚丙烯老化的影响程度,然后基于 COMPASS (condensed - phase optimized molecular poten-

tials for atomistic simulation studies)力场的分子动力学计算热应力下聚丙烯的力学和绝缘性能变化,对比分析了羰基对于聚丙烯热老化的影响。

1 分子动力学模拟

1.1 力场选择

力场作为势能面经验表达式,在分子动力学模拟过程中起重要作用。本文根据目标不同,选择不同力场进行分子动力学仿真分析。

ReaxFF 是于2001年首次提出的基于键级(bond order, BO)和键距(bond distance, BD)间关系的分子力场^[15],可以实现分子化学键断裂与生成及电子转移的动态过程模拟。本文选择 ReaxFF 分子力场分析电热应力下聚丙烯微观动态反应以及主要产物形成过程。

COMPASS力场往往用于有机和部分无机分子、高分子的分析^[16-17],本文选择 COMPASS 材料力场分析热应力下聚丙烯老化参数变化。

1.2 模型搭建

i-PP 的分子式见图1。

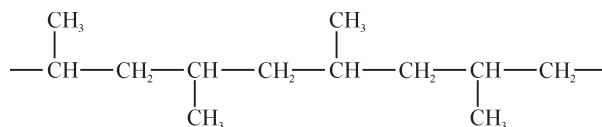


图1 等规聚丙烯分子式

Fig. 1 Molecular formula of isotactic polypropylene

实际工程中电容器内环境接近真空,但是依然会存在少量空气,聚丙烯薄膜产生老化的主要原因因为空气中氧气的存在导致的氧化,因此将聚丙烯与氧气分子同时放入晶胞模型来模拟真实工作情况。对初始模型进行几何优化与模拟退火,降低初始模型能量,提高其稳定性,保证模型与实际情况吻合^[18]。优化后的模型见图2。

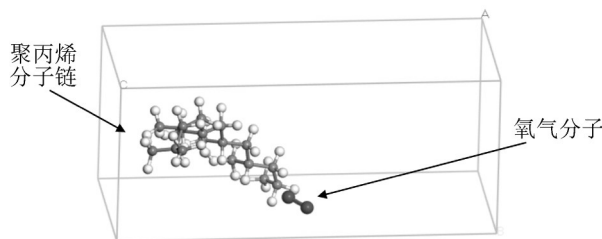


图2 聚丙烯系综优化模型

Fig. 2 Optimization model of polypropylene ensemble

研究发现聚丙烯分子链中含有大量键能较低的叔氢键,受电、热应力的影响容易断裂并形成活泼的叔碳自由基^[19-20],所以在聚丙烯模型基础上对叔氢键人为断裂,生成一个羰基,优化后模型见图3。

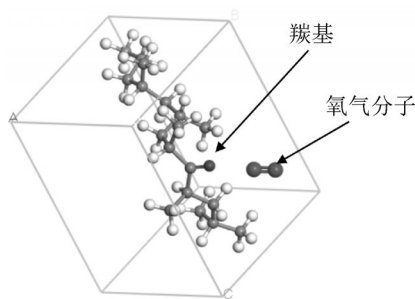


图3 带羰基聚丙烯系综优化模型
Fig. 3 Optimization model of polypropylene with carbonyl group ensemble

为模拟电热应力老化下聚丙烯微观动态反应,搭建 $30 \times 30 \times 30$ Å 的周期性无定形胞体系模型,模型中放置 10 个氧气分子与两条长度为 20 的聚丙烯链,为了提高计算效率,保持体系中原子数量为 600 左右。为使模型体系与实际情况更加吻合,在进行分子动态模拟前,进行弛豫与动力学优化,降低模型体系的总能量,寻找该体系可能趋于的最小能量值,优化后模型见图 4。

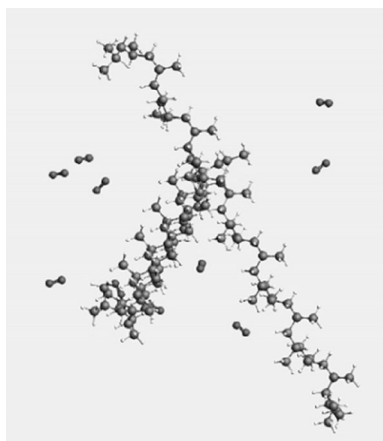


图4 聚丙烯与氧气模型
Fig. 4 Model of polypropylene and oxygen

2 聚丙烯老化产物分析

2.1 热应力老化

由于计算机计算性能限制,分子动力学模拟的时间尺度在皮秒级,常规温度无法在如此短时间内满足聚丙烯分子裂解反应要求,所以在 $1\,500 \sim 2\,700$ K 温度范围内使用分子动态模拟进行定性分析,发现模型在 $2\,000$ K 及以下时无裂解反应发生。因此选择在 $2\,100$ K、 $2\,400$ K、 $2\,700$ K 3 种温度下进行 20 ps 老化反应的模拟。

为保证结果的可靠,每种温度重复模拟 10 次,主要反应分子数量变化见图 5。结合模拟过程发现,当温度逐渐升高时,聚丙烯分子链发生扭动,但

并未发生断裂现象, $2\,000$ K 时处于反应的临界状态,氧气分子开始发生断裂。继续升高至 $2\,100$ K,由于聚丙烯分子链中的 C-H 键能较低,分子链发生断裂,氧气与 C-H 键断裂处发生化学反应,同时聚丙烯的 C-C 链断裂,氧原子与碳原子联结形成羰基,见图 6,这说明在聚丙烯薄膜老化前期,氧气的存在导致其与聚丙烯发生反应造成聚丙烯结构变化,并且在有限的温度升高范围内,羰基极易作为反应产物出现。继续升高温度,氧气参与反应率增加,聚丙烯分子链分解程度增加,碳链长的碳氢化合物数量减少,碳链短的碳氢化合物数量增多。

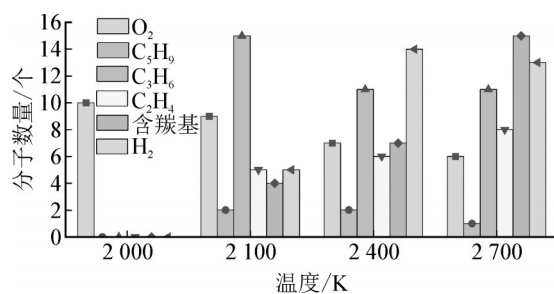


图5 不同温度下主要反应分子数量
Fig. 5 Number of main reaction at different temperatures

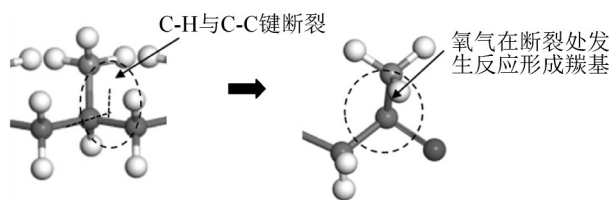


图6 产生羰基的老化过程
Fig. 6 Aging process of generating carbonyl groups

2.2 电应力老化

在聚丙烯分子临界反应温度 $2\,000$ K 时,进行 10 kV/mm、 50 kV/mm、 100 kV/mm 电场环境下的模拟,同一环境重复模拟 10 次。不同场强下分子数量变化如图 7 所示,可见当电场强度为 10 kV/mm 与 50 kV/mm 时,分子数量与不加电场时几乎一致。

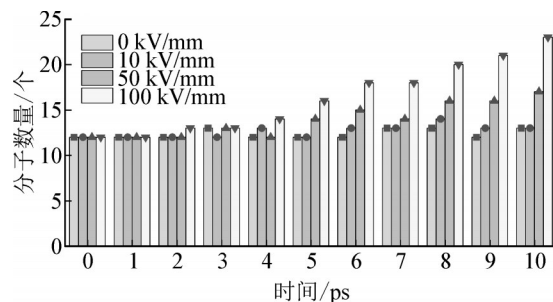


图7 $2\,000$ K 时不同场强下的分子数量
Fig. 7 Number of molecules under different field strength at $2\,000$ K

增加电场强度至电容器常见工作环境 100 kV/mm 时,分子数量发生明显变化,少量氧气与聚丙烯分子发生反应,部分分子的数量变化如图 8 所示。电场作用 2.3 ps 时,一个氧气分子键断裂,生成两个氧原子。电场作用 4 ps 时,一个聚丙烯链出现断裂,9.3 ps 时第二条也发生了分解,说明持续施工作电场一段时间后才会出现明显的老化现象。与未施加电场的情况进行对比,一定强度的电场加速了聚丙烯链的分解反应,因此电场的存在会加速聚丙烯结构的变化。

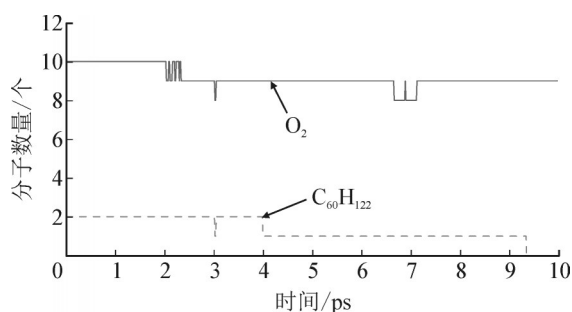


图8 2000 K时100 kV/mm场强下分子数量
Fig. 8 Number of molecules at 100 kV/mm field strength at 2000 K

不加电场、逐渐增加温度和恒定温度 2000 K、逐渐增加电场强度时反应分子数量与分子种类的变化见图 9,临界温度 2000 K 上升 100 K 与临界温度施加 100 kV/mm 电场相比,反应分子变化相差了 4.3 倍,反应分子种类相差 2 倍,可见热应力对于聚丙烯分子链的老化裂解影响显著大于电应力。

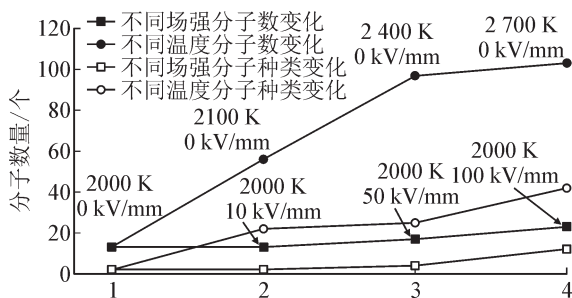


图9 不同环境时分子数量随时间变化
Fig. 9 Variation of number of molecules with time in different environments

3 热老化分析

根据上述结果可得,热应力在聚丙烯电热老化过程中占主导地位,因此本文继续研究聚丙烯分子在热应力作用时的力学和绝缘性能变化,并研究羰基在聚丙烯热老化过程中的作用。

3.1 稳定性

链运动可以反映聚合物的热稳定性和机械性

能,使用均方位移(mean square displacement, MSD)描述分子链运动^[21]。链运动 MSD 斜率代表分子链运动的强弱,斜率越大,链运动越强烈,稳定性越低。在斜率相同时,可以根据链运动 MSD 大小比较链运动的强弱程度。MSD 计算公式为

$$MSD = \langle |\vec{r}_i(t) - \vec{r}_i(0)|^2 \rangle \quad (1)$$

式中: $\langle \rangle$ 为系综平均值; $\vec{r}_i(t)$ 为分子在 t 时刻的位置; $\vec{r}_i(0)$ 为分子初始位置。

根据 MSD 特性,不同结构分子链链运动 MSD 数值大小比较无意义,所以分别将聚丙烯与含羰基聚丙烯链运动 MSD 归一化,见图 10。观察发现不同温度下的链运动 MSD 均随时间逐渐增大,这是由于在等湿等压的环境下,温度的升高会伴随膨胀,系统和自由体积不断增大,分子的间距也随之增加,结合高温对分子运动能力的加强,分子链运动 MSD 不断增加,这也说明温度作用时间同样影响聚丙烯的稳定性。600 K 时聚丙烯链运动较初始位置变化显著高于 300~450 K,说明在 600 K 时聚丙烯分子链发生了明显的变化。

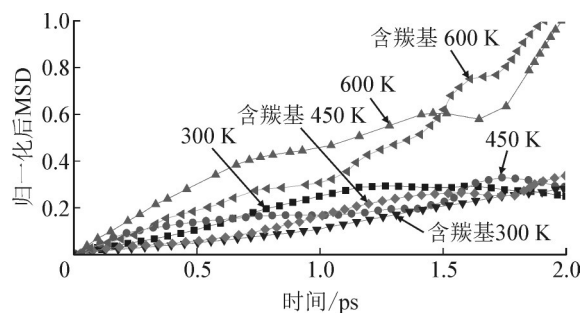


图10 不同温度下聚丙烯链运动 MSD
Fig. 10 MSD of polypropylene chain movement at different temperatures

为方便对比羰基对于聚丙烯老化的影响,计算归一化后链运动 MSD 斜率,见图 11。

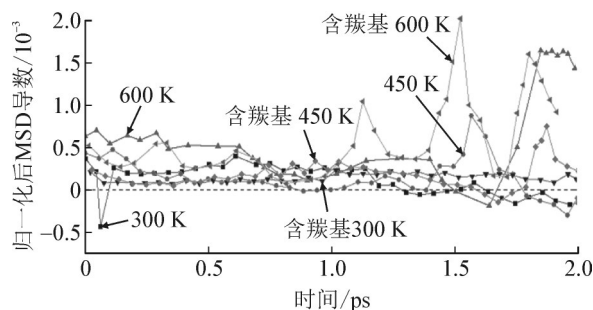


图11 不同温度下聚丙烯链运动 MSD 斜率
Fig. 11 MSD slope of polypropylene chain motion at different temperatures

观察发现 300~450 K 温度范围内链运动 MSD 斜率逐渐趋向于 0,这说明当聚丙烯达到一定活性时

热稳定性几乎不变。温度为 600 K 时,聚丙烯的链运动程度不断增加,未呈现明显的平稳趋势,说明在 300~450 K 时,聚丙烯能够保持良好的机械特性和稳定性,而高于 600 K 时稳定性显著下降,结构可能发生剧烈变化。同时对比同一温度下聚丙烯链运动活性趋势,含羰基聚丙烯链运动强度均强于不含羰基的聚丙烯分子,这说明羰基的存在影响了聚丙烯的稳定性。

3.2 力学性能

力学参数可以反映材料硬度,是各种粒子之间键合强度的表现,主要包括剪切模量 G 、杨氏模量 E 和体积模量 K 3 种弹性模量和泊松比 ν [22]。

在平衡体系中施加一个微小应力,计算该平衡体系对此应变的反应,便可求出刚度矩阵 C_{ij} 。

$$C_{ij} = \begin{bmatrix} \lambda + 2\mu & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda + 2\mu & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & \lambda + 2\mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu \end{bmatrix} \quad (2)$$

通过刚度矩阵,求解拉梅常数 λ 和 μ ,其中拉梅常数 λ 表示了聚丙烯的压缩性,拉梅常数 μ 反应了聚丙烯的剪切性 [23-24]。

$$\lambda = \frac{1}{6}(C_{12} + C_{13} + C_{21} + C_{23} + C_{31} + C_{32}) \quad (3)$$

$$\mu = \frac{1}{3}(C_{44} + C_{55} + C_{66}) \quad (4)$$

通过拉梅常数 λ 和 μ 即可解出三种弹性模量和泊松比的数值,计算公式为

$$K = \lambda + \frac{2}{3}\mu \quad (5)$$

$$G = \mu \quad (6)$$

$$E = \mu \frac{3\lambda + 2\mu}{\lambda + \mu} \quad (7)$$

$$E = 2G + (1 + \nu) = 3K(1 - 2\nu) \quad (8)$$

将优化后的聚丙烯模型在 300 K、450 K、600 K 温度时,进行恒压恒温系综的分子动力学平衡,当分子模型基本平衡后,分析其力学性能。聚丙烯在 300 K 时弹性刚度矩阵见表 1。

表 1 聚丙烯在 300 K 时刚度矩阵
Table 1 Stiffness matrix of polypropylene at 300 K

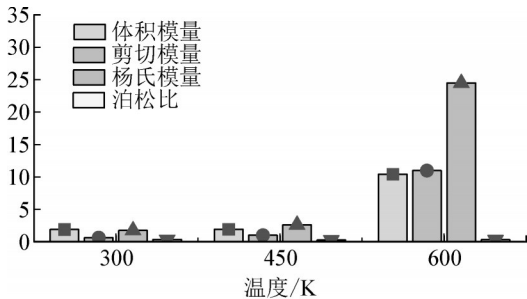
C_{ij}	1	2	3	4	5	6
1	6.39	1.83	1.31	-0.66	-0.15	0.38
2	1.83	2.82	1.24	0.12	-0.08	0.34
3	1.31	1.24	1.78	0.12	0.23	-0.07
4	-0.66	0.13	0.12	0.17	-0.04	0.03
5	-0.15	-0.08	0.23	-0.04	1.04	0.02
6	0.38	0.34	-0.07	0.03	0.02	0.75

根据刚度矩阵,求得聚丙烯在不同温度时的拉梅常数见表 2。

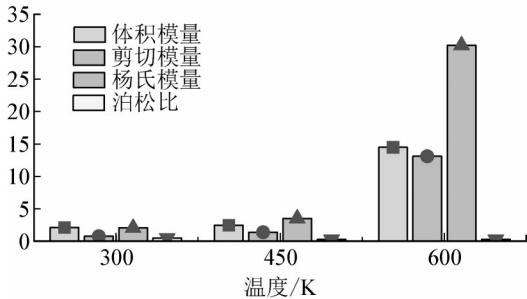
表 2 不同材料在不同温度时的拉梅常数
Table 2 Lamé constant of different materials at different temperatures

种类	300 K		450 K		600 K	
	λ	μ	λ	μ	λ	μ
聚丙烯	1.46	0.65	1.24	1.02	3.08	11
带羰基聚丙烯	1.61	0.77	1.54	1.39	5.74	13.1

根据拉梅常数求得各环境下材料的力学参数见图 12。



(a) 聚丙烯



(b) 含羰基聚丙烯

图 12 聚丙烯材料不同温度时力学参数
Fig. 12 Mechanical parameters of polypropylene materials at different temperatures

观察图 12(a)发现,600 K 时聚丙烯分子弹性模量显著高于 300~450 K。出现此现象的原因是温度的升高使分子链热运动更加剧烈,高分子链更趋于卷曲分子构象,导致回缩张力与弹性模量的增大,即聚丙烯刚度值大幅增加。同时也说明聚丙烯材料对温度的敏感性,当温度达到 600 K 时力学性能骤降。泊松比的变化也证明了聚丙烯材料随温度升高,刚度越来越大的力学性能

观察图 12(b)发现,含羰基聚丙烯弹性模量与泊松比随温度的变化趋势与聚丙烯一致,但是羰基的存在使相同环境下弹性模量有所增大,在不同温度时羰基的存在使得弹性模量分别增加了 15.3%, 32.85% 和 27.08%,即更容易发生分子链运动,宏观表现为更容易发生严重的脆化,因此羰基会加速聚

丙烯的老化速度。

3.3 绝缘性能

固体材料的电气性能与其微观的能带结构具有一定关联性^[25],通过对聚丙烯分子模型进行几何优化,计算聚丙烯和带羰基聚丙烯的能带结构,探究羰基在聚丙烯老化过程中对聚丙烯绝缘性能的影响。

分子模型几何优化的泛函选择广义梯度近似,截断能设为 380 eV。模拟几何优化后聚合物的电子结构,其能带结构见图 13。

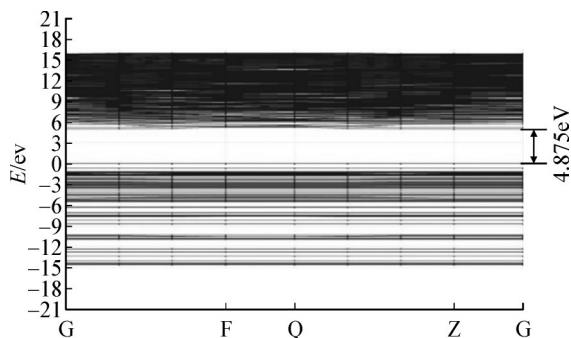


图 13 聚丙烯能带图

Fig. 13 Polypropylene energy band diagram

图 13 中能量为 0 的虚线为费米能级,费米能级和导带未相交,则材料为导体或绝缘体。能带结构分为价带、禁带和导带,导带和价带之间的空隙称为能隙。由图 13 可知,聚丙烯能隙为 4.88 eV,材料为绝缘体。

将带羰基聚丙烯分子模型进行电子结构的运算,结果见图 14。此时能隙为 3.5 eV,与聚丙烯相比,带羰基的聚丙烯模型能隙下降 28.21%,绝缘性能降低,说明羰基存在的影响了聚丙烯的绝缘性能。

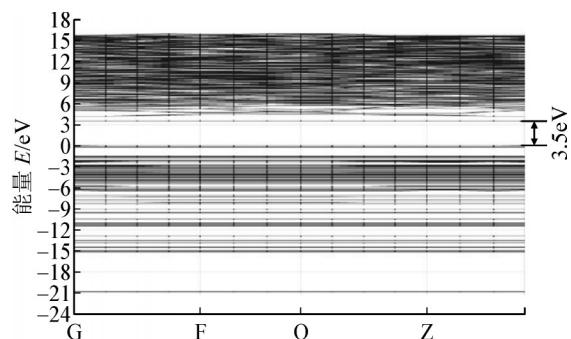


图 14 带羰基聚丙烯能带图

Fig. 14 Polypropylene energy band diagram with carbonyl groups

4 结语

1)在电热应力老化过程中,聚丙烯分子热老化占主导地位。聚丙烯分子老化时 C-H 键首先发生断裂,氧气与 C-H 键断裂处发生化学反应,同时 C-

C 键断裂,氧原子参与反应形成羰基,随着温度继续升高,聚丙烯分子链分解产物增加,氧气参与反应率增加。

2)温度会影响聚丙烯分子的稳定性。在小于 450 K 温度范围内,聚丙烯的弹性模量和泊松比基本不变;当温度达到 600 K 时,聚丙烯弹性模量急速增加,泊松比减小,聚丙烯材料发生了严重的脆化,分子链稳定性显著下降。

3)羰基会影响聚丙烯老化过程中力学和绝缘性能的变化。与不含羰基聚丙烯分子相比,含羰基聚丙烯分子的能隙值下降了 28.21%,其弹性模量在 300 K、450 K 和 600 K 温度时分别增加了 15.3%、32.85% 和 27.08%。

参考文献

- [1] 成庶,刘嘉文,伍珣,等. 基于特征提取与误差补偿的金属化薄膜电容器剩余寿命预测[J]. 中国电机工程学报, 2022,42(7):2672-2680.
CHENG Shu, LIU Jiawen, WU Xun, et al. Residual life-time prediction of metallized film capacitors based on feature extraction and error compensation[J]. Proceedings of the CSEE, 2022,42(7):2672-2680.
- [2] 潘毓娴,储松潮,黄云锴,等. 蒸镀 Al_2O_3 复合聚丙烯薄膜及其电容器性能研究[J]. 电力电容器与无功补偿, 2020, 41(4):25-30.
PAN Yuxian, CHU Songchao, HUANG Yunkai, et al. Study on properties of evaporated Al_2O_3 composite polypropylene film and its capacitors[J]. Power Capacitor & Reactive Power Compensation, 2020,41(4):25-30.
- [3] 左干清,叶建铸,石延辉,等. 特高压换流站直流滤波电容器故障分析研究[J]. 电力电容器与无功补偿, 2013,34(6):88-94.
ZUO Ganqing, YE Jianzhu, SHI Yanhui, et al. Study on fault analysis of DC filter capacitor for UHV converter station[J]. Power Capacitor & Reactive Power Compensation, 2013,34(6):88-94.
- [4] KURIMSKY J, KOSTEREC M, VARGOVÁ B. Breakdown voltage of polypropylene film during C and thermal ageing [C]//2017 18th International Scientific Conference on Electric Power Engineering (EPE). [S.l.]: IEEE, 2017:1-4.
- [5] 张健,余超耘,潘亮,等. 基于表面分析的金属化膜电容器老化机理研究[J]. 广东电力, 2019,32(8):119-125.
ZHANG Jian, YU Chaoyun, PAN Liang, et al. Study on aging mechanism of metallized film capacitor based on surface analysis[J]. Guangdong Electric Power, 2019, 32(8): 119-125.
- [6] ISHIWATARI M. Effect of temperature on the decomposition mechanism of polypropylene[J]. Journal of Polymer Science Polymer Letters Edition, 1984,22(2):83-88.

- [7] CHANG Tianying, ZHANG Xiansheng, GUO Qijia, et al. Terahertz dielectric spectroscopy based thermal aging analysis of polypropylene[J]. IEEE Transactions on Terahertz Science and Technology, 2020, 10(4): 363-369.
- [8] 刘宏博, 程璐, 徐哲, 等. 热老化对电容器用聚丙烯薄膜结构及电学性能的影响[J]. 绝缘材料, 2023, 56(2): 96-103.
LIU Hongbo, CHENG Lu, XU Zhe, et al. Influence of thermal ageing on structure and electrical properties of polypropylene film for capacitors[J]. Insulating Materials, 2023, 56(2): 96-103.
- [9] WANG Jie, WANG Guichang. Mechanisms of CH₄ activation over oxygen-preadsorbed transition metals by ReaxFF and AIMD simulations[J]. Journal of Computational Chemistry, 2023(9): 272-289.
- [10] AFROZ M M, SHIN K Y, DUIN T C A, et al. ReaxFF reactive force field model enables accurate prediction of physicochemical and mechanical properties of crystalline and amorphous shape memory polyurethane[J]. Journal of Applied Polymer Science, 2023, 140(39): 5-10.
- [11] SCHERAGA H A, KHALILI M, LIWO A. Protein-folding dynamics: overview of molecular simulation techniques[J]. Annual Review of Physical Chemistry, 2007, 58(1): 57-83.
- [12] LIU Xiaolong, LI Aoaoxia, LIU Jian, et al. Study of high density polyethylene(HDPE)pyrolysis with reactive molecular dynamics[J]. Polymer Degradation and Stability, 2014, 104(1): 62-70.
- [13] 孙浩, 姚贵策, 高慧, 等. 基于 ReaxFF 反应分子动力学模拟的正十二烷醇的热分解特性研究[J]. 工程热物理学报, 2023, 44(2): 444-450.
SUN Hao, YAO Guice, GAO Hui, et al. Study on the thermal decomposition characteristics of n-dodecanol based on ReaxFF reaction molecular dynamics simulation[J]. Journal of Engineering Thermophysics, 2023, 44(2): 444-450.
- [14] 任春醒, 李晓霞, 牛诗尧, 等. 利用反应分子动力学研究 CL-20 不同晶型热响应的构象转变和初始分解[J]. 火炸药学报, 2022, 45(6): 793-806.
REN Chunxing, LI Xiaoxia, NIU Shiyao, et al. Revealing the thermal responses of CL-20 polymorphs by conformer transformation and initial decomposition using ReaxFF molecular dynamics simulations[J]. Chinese Journal of Explosives & Propellants, 2022, 45(6): 793-806.
- [15] 李坤, 顾伯勤, 王成. 基于分子动力学的密封材料界面结合能研究[J]. 合成橡胶工业, 2021, 44(4): 289-293.
LI Kun, GU Baiqin, WANG Cheng. Study on interface binding energy of sealing materials based on molecular dynamics[J]. China Synthetic Rubber Industry, 2021, 44(4): 289-293.
- [16] 李陶然. 水泥主要组成的结构及力学性能的分子动力学模拟研究[D]. 深圳: 深圳大学, 2019.
- [17] VAN D A C, DASGUPTA S, LORANT F, et al. ReaxFF a reactive force field for hydrocarbons[J]. Journal of Physical Chemistry a, 2001, 105(41): 9396-9409.
- [18] WOODS B S, ACIOLI P H. Drag assisted simulated annealing method for geometry optimization of molecules[J]. Procedia Computer Science, 2015, 51: 1878-1886.
- [19] 樊林祺, 李琦, 袁浩, 等. 接枝对聚丙烯绝缘材料热氧老化的影响及机理[J]. 中国电机工程学报, 2022, 42(11): 4227-4237.
FAN Linzhen, LI Qi, YUAN Hao, et al. Influence and mechanism of grafting on thermal oxidative aging of polypropylene[J]. Proceedings of the CSEE, 2022, 42(11): 4227-4237.
- [20] ZHANG Yuanyuan, LI Shengtao, GAO Jian, et al. Ageing assessment of XLPE cable insulation by residual antioxidant content[J]. IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation, 2020, 27(6): 1795-1802.
- [21] 王玉晶. 高性能苯丙树脂的制备及应用研究[D]. 青岛: 青岛科技大学, 2022.
- [22] 张振. 基于第一性原理计算的多元碳化物 MC(M=Ti, Zr, Hf, Ta) 的成分设计与性能研究[D]. 大连: 大连理工大学, 2022.
- [23] 翟鹏飞, 彭玉峰, 韩雪云. 不同温度和压强下甲基乙烯基硅橡胶聚合物的分子动力学模拟研究[J]. 电瓷避雷器, 2021(2): 212-218.
ZHAI Pengfei, PENG Yufeng, HAN Xueyun. Molecular dynamics simulation of methyl vinyl silicone rubber polymer at different temperatures and pressures[J]. Insulators and Surge Arresters, 2021(2): 212-218.
- [24] 黄勤. Materials Studio 模拟分析葡甘聚糖分子模型力学性能[D]. 福州: 福建农林大学, 2014.
- [25] 陈旭, 侯文雷, 黄俊嘉, 等. 集成双波导量子阱结构半导体光放大器的能带结构研究[J]. 电子世界, 2020(7): 27-28.
CHEN Xu, HOU Wenlei, HUANG Junjia, et al. Study on the band structure of integrated double waveguide quantum well semiconductor optical amplifiers[J]. Electronics World, 2020(7): 27-28.

作者简介:

高煦轲(2000—), 男, 硕士研究生, 主要从事电气设备绝缘材料试验及理论计算方面的研究工作。

常曦文(2001—), 女, 硕士研究生, 主要从事电气设备绝缘材料试验及理论计算方面的研究工作。

仝殿杰(1999—), 男, 硕士研究生, 主要从事电气设备绝缘材料试验及理论计算方面的研究工作。

王璁(1980—), 男, 高级工程师, 通信作者, 主要从事电气设备绝缘材料试验及理论计算方面的研究工作。

屠幼萍(1966—), 女, 教授, 主要从事高电压绝缘技术、电介质介电特性的研究工作。