基于功能化Nano-SiO_2界面设计的PA6复合材料电绝缘及力学性能协同提升研究

游玲玲[1],周 丽[2],郝 莹[1]

(1.泰山科技学院,山东 泰安 271000;2.山东信息职业技术学院,山东 潍坊 261061)

摘 要: 针对PA6在强电场-温湿耦合条件下电绝缘性能与力学性能协同性不足的问题,文章提出"硅烷(KH-550)功能化纳米二氧化硅(Nano-SiO_2)界面设计"的改性思路,利用分子动力学方法构建PA6、SiO_2/PA6、KH-550/PA6及SiO_2(KH-550)/PA6四类模型体系,系统计算自由体积分布与自由体积分数、均方位移、界面结合能、氢键统计、径向分布函数、弹性模量、体积模量、相对介电常数、击穿场强等关键性能参数。结果表明:SiO_2(KH-550)/PA6显著增强界面耦合并诱导结构致密化,SiO_2(KH-550)/PA6自由体积分数由15.78%降至12.13%,氢键数量由66增至112且平均距离缩短,界面结合能绝对值最大,形成更稳定的界面束缚层;链段运动整体受限(均方位移降低),局部短程有序性增强(径向分布函数峰形更集中)。在宏观性能上,SiO_2(KH-550)/PA6的弹性模量与体积模量分别提升至4.37 GPa与4.72 GPa;相对介电常数由3.14降至2.32,击穿场强由6 869×10^3 kV/mm升至8 751×10^3 kV/mm,实现"介电常数降低,击穿强度提升"的协同优化。KH-550功能化Nano-SiO_2通过"界面强化→氢键网络增密→自由体积压缩→链段受限"的作用链条有效提升PA6复合材料的电绝缘裕度与力学承载能力。研究为热塑性绝缘复合材料的界面工程与配方优化提供参考。

关键词: PA6;分子动力学;Nano-SiO_2;KH-550;电绝缘性能

中图分类号: TQ323.6 **文献标志码:** A **文章编号:** 1005-3360(2026)09-0168-06

DOI: 10.15925/j.cnki.issn1005-3360.2026.09.030

Study on Synergistic Improvement of Electrical Insulation and Mechanical Properties of PA6 Composites Based on Functionalized Nano-SiO_2 Interface Design

YOU Lingling[1], ZHOU Li[2], HAO Ying[1]

(1. Taishan College of Science and Technology, Taian 271000, China; 2. Shandong Vocational College of Information Technology, Weifang 261061, China)

Abstract: To address the issue of insufficient synergy between electrical insulation and mechanical properties of PA6 under strong electric field coupled with temperature and humidity conditions, the article proposed a modification strategy involving "interfacial design with silane (KH-550) functionalized nano-silica (Nano-SiO_2)". Four types of model systems, namely PA6, SiO_2/PA6, KH-550/PA6, and SiO_2(KH-550)/PA6, were constructed using molecular dynamics simulations. Key property parameters including free volume distribution and fractional free volume, mean square displacement, interfacial binding energy, hydrogen bond statistics, radial distribution function, elastic modulus, bulk modulus, relative dielectric constant and breakdown strength were systematically calculated. The results showed that the interfacial coupling of SiO_2 (KH-550)/PA6 was significantly enhanced, inducing structural densification. The fractional free volume of SiO_2 (KH-550)/PA6 decreased from 15.78% to 12.13%, the number of hydrogen bonds increased from 66 to 112 with shortened average distances, and the absolute value of interfacial binding energy reached the maximum, indicating the formation of a

收稿日期Submitted date 2025-12-18;修回日期Revised date 2026-01-15;录用日期Accepted date 2026-02-02

基金项目:山东省高等教育学会高等教育研究专项课题项目(SDGJ2025C09);泰山科技学院2024年度校级教学团队"智能制造工程专业教学团队"建设项目(Tk2024xjjxtd002)

联系人,youll008@163.com

引用本文:游玲玲,周丽,郝莹.基于功能化Nano-SiO_2界面设计的PA6复合材料电绝缘及力学性能协同提升研究[J].塑料科技,2026,54(9):168-173.

Citation: YOU L L, ZHOU L, HAO Y. Study on synergistic improvement of electrical insulation and mechanical properties of PA6 composites based on functionalized Nano-SiO_2 interface design[J]. Plastics Science and Technology, 2026, 54(9): 168-173.

more stable interfacial bound layer. The segmental motion was overall restricted (as evidenced by reduced mean square displacement), while local short-range ordering was enhanced (as indicated by more concentrated radial distribution function peaks). In terms of macroscopic properties, the elastic modulus and bulk modulus of SiO_2(KH-550)/PA6 increased to 4.37 GPa and 4.72 GPa, respectively. Relative dielectric constant decreased from 3.14 to 2.32, and breakdown strength increased from 6 869×10^3 kV/m to 8 751×10^3 kV/mm, achieving a synergistic optimization of "reduced permittivity and enhanced breakdown strength". KH-550 functionalized Nano-SiO_2 effectively improved the electrical insulation margin and mechanical load-bearing capacity of PA6 composites through the action chain of "interfacial reinforcement→hydrogen bond network densification→free volume compression→segmental confinement", providing reference for interface engineering and formulation optimization of thermoplastic insulating composites.

Keywords: PA6; Molecular dynamics; Nano-SiO_2; KH-550; Electrical insulation

在电力装备与高场强绝缘体系中，环氧树脂等热固性树脂复合材料占据主导地位，被广泛用于干式电抗器、干式变压器、复合绝缘子与复合横担等电力场景[1-5]。在实际服役中，绝缘材料往往需要同时经受温度-湿度耦合与电力加载，水分渗入可诱发界面剥离、介损上升并触发闪络/击穿等失效，进而威胁系统安全[1-6]。面向轻量化、可回收与连续化加工需求，热塑性材料替代热固性材料体系的趋势日益显著。尼龙6 (PA6)凭借成型效率与力学韧性等优势受到关注。然而，其在高温高湿与强电场耦合环境下仍可能面临电绝缘及力学性能协同性不足等问题，因此亟须通过界面与结构设计对热塑性材料进行针对性改性，以期提高综合性能。

研究人员通常通过共混增韧、结晶调控、填料增强、界面偶联等途径增强PA6性能。在绝缘及力学性能等多目标优化中面临的关键瓶颈往往在于纳米填料和聚合物界面。一方面，纳米填料可构建更曲折的扩散路径，压缩自由体积分数(F)，从而限制小分子与链段运动；另一方面，界面相互作用会直接影响陷阱分布与电荷行为，进而改变击穿过程。通过无机纳米填料改性可降低水分扩散，提升绝缘可靠性[7-9]。从机理上看，填料占据基体自由体积，压缩分子迁移空间，并在模拟中表现为均方位移与扩散系数降低[1]。同时，界面结合增强会带来更强的范德华作用与更高的界面结合能，可能对应更深陷阱与更强的电荷屏蔽能力，进而提升击穿强度[10]。功能化纳米二氧化硅(Nano-SiO_2)具有介电稳定性，可提供高比表面积界面；硅烷(如KH-550)偶联能够改善填料分散性与界面黏结，将纳米物理填充升级为化学氢键耦合。尽管相关思路在多种聚合物体系中被反复验证，但针对硅烷活化Nano-SiO_2增强PA6这一界面设计策略，目前仍缺少围绕电绝缘及力学协同提升的系统性研究。

分子动力学模拟能够在原子尺度直接量化界面相互作用强度，同步追踪自由体积、链段运动与结构有序度等关键微观变量，进而将界面改性带来的变化与介电、热学与力学响应建立可验证的对应关系[10]。此外，分子模拟已被用于复合绝缘材料热学、电学、力学性能等多指标的计算与筛选，可通过界面能及物理化学统计等方法解释性能提升原因[10]。因此，本研究设计功能化Nano-SiO_2界面设计的PA6复合体系，构建PA6、SiO_2/PA6、KH-550/PA6与SiO_2(KH-550)/PA6模型，结合界面结合能、均方位移、自由体积分布、氢键与径向分布函数[$g(r)$]等揭示“界面强化→氢键网络增密→自由体积压缩→链段受限”的作用机理，为配方与工艺的定向优化提供参考。

1 模型构建及优化

图1为模型分子构型。在分子绘制器中构建PA6单体，如图1a所示。采用Polymer Builder聚合得到聚合度为5的PA6分子链，如图1b所示。在Amorphous Cell中导入并随机生成20条分子链的三维无定形聚合物结构，共构建10个模型，从中找到能量最低的模型作为初始模型，如图1f所示。构建如图1c所示的SiO_2团簇和图1d所示的KH-550分子，将KH-550与SiO_2进行表面羟基接枝，得到SiO_2(KH-550)，如图1e所示。分别将无定形PA6体系与SiO_2、KH-550及接枝后的SiO_2(KH-550)放入同一周期性盒中拼装出不同的界面体系，得到各体系的初始构型。

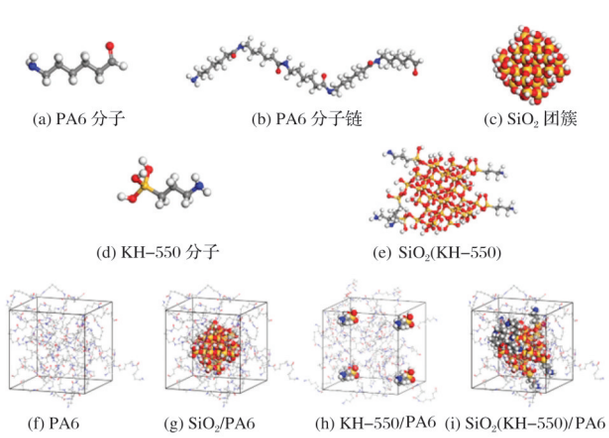


图1 模型分子构型

Fig.1 Molecular configuration of models

在Forcite模块下通过Smart算法对模型进行系统性能量弛豫与分子动力学平衡。迭代步数为50 000步，设置时间步长为1 fs，让整个体系收敛到局部能量最低的稳定状态。按顺序进行分子动力学弛豫。体系在298 K恒温条件

下依次进行正则系综(NVT)与等温等压系综(NPT)平衡，收敛体系密度，设置时间步长为1 fs，各阶段模拟时长均为300 ps。在整个模拟过程中，温度控制采用Andersen热浴法，压力调控采用Berendsen压浴法，范德华相互作用通过Atom Based截断法计算，静电作用则采用Ewald法进行处理。当各体系能量已达平衡且波动较小，密度也趋于平衡，认为模型可反映实际工况。选择平衡后的结构作为初始构型，如图1f~图1i所示。

2 结果与讨论

2.1 界面稳定性分析

界面结合能用于量化填料/改性剂与基体的相互作用，是判断界面黏结与载荷传递能力的关键指标[11-12]。图2为不同体系的界面结合能。从图2可以看出，各体系在0~10 ps内界面结合能快速变化，随后进入稳定平台，表明界面经历构型调整后达到动态平衡。稳态阶段存在明显差异。SiO_2/PA6的界面结合能为正且处于较高水平，说明未功能化的SiO_2与PA6相容性不足，界面作用偏弱，易形成空隙与脱黏；KH-550/PA6的界面结合能转为负值且较为稳定，表明KH-550可显著增强对PA6的吸引作用；SiO_2(KH-550)/PA6的界面结合能最低(负值绝对值最大)，说明功能化SiO_2与PA6形成最强界面耦合，界面稳定性与传载效率最佳。

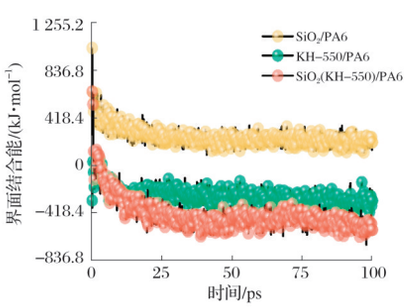


图2 不同体系的界面结合能

Fig.2 Interfacial binding energy of different systems

2.2 微观结构分析

氢键网络是PA6体系中决定链段约束、界面黏结与结构致密化的重要非共价作用，氢键网络的强弱与数量变化可直接反映界面相容性与微观稳定性差异[13]。图3为不同体系的氢键分布。从图3可以看出，PA6体系氢键主要分布于链段之间，整体数量有限；引入SiO_2或KH-550后，氢键在填料/改性剂附近明显富集，表明界面区域形成更强的相互作用网络，其中功能化SiO_2体系SiO_2(KH-550)/PA6的界面氢键最为密集，呈现更典型的界面束缚层特征。

表1为298 K下不同体系的氢键数量和平均距离。从表1可以看出，PA6体系氢键数量为66个，平均距离为0.215 3 nm。加入KH-550后，KH-550/PA6体系氢键数量增至83个，平均距离略降至0.214 9 nm，说明KH-550可提供额外的极性位点并增强与PA6的相互作用。SiO_2/PA6体系氢键数量为81个，平均距离降至0.212 2 nm，表明引入SiO_2后界面附近形成氢键耦合。SiO_2(KH-550)/PA6体系氢键数量最高，为112个，平均距离最短，为0.211 3 nm。KH-550功能化显著强化了SiO_2与PA6之间的界面作用，使氢键网络更密集、更稳定。氢键数量的增加与平均距离的缩短将有效限制链段运动并促进局部堆砌[14-15]，从而降低F，提高界面结合能，形成机理闭环，为电绝缘性能及力学性能的协同改善提供了微观依据。

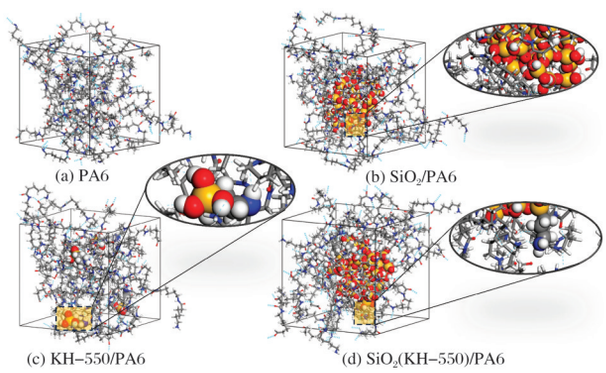


图3 不同体系的氢键分布

Fig.3 Hydrogen bonds distribution of different systems

表1 298 K下不同体系的氢键数量和平均距离

Tab.1 Hydrogen bond number and average distance of different systems at 298 K

体系	氢键数量/个	平均距离/nm
PA6	66	0.215 3
KH-550/PA6	83	0.214 9
SiO_2/PA6	81	0.212 2
SiO_2(KH-550)/PA6	112	0.211 3

$g(r)$用于表征原子对在不同距离处的分布概率，可反映局部堆砌与短程有序程度，从而辅助判断界面调控对微观结构的影响[16]。图4为不同体系的$g(r)$。从图4可以看出，各体系$g(r)$主峰位置基本一致，说明改性并未改变PA6的基本链段构型。在部分特征距离处，峰强与峰形存在差异，表明界面作用引起了体系局部结构重排。在径向距离(r)为0.11 nm附近(图中标注C—H)，各体系均出现尖锐峰，峰位稳定而峰高略有变化，表明改性主要影响链段周围的堆砌紧密程度。放大区域所示的次级峰，发现其对体系差异更敏感，功能化体系峰形更清晰，分布更集中，说明界面作用增强后链段排布更稳定，提高短程有序性。对于含SiO_2体系，在Si—O相关距离附近出现特征峰，其中SiO_2(KH-550)/PA6的界面相关峰更明显，表明KH-550通过功能化促进SiO_2与PA6形成更紧密、更稳定的界面结构。$g(r)$的结果与氢键增多、F降低的结果相一致，从结构层面支持“界面强化→氢键网络增密→自由体积压缩→链段受限”的机理链。

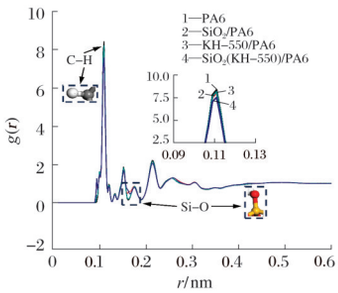


图4 不同体系的$g(r)$

Fig.4 $g(r)$ of different systems

2.3 链段动力学分析

自由体积是解释链段运动、极化响应及击穿行为的重要结构指标，能够反映聚合物链段堆砌的致密程度与可迁移空间[17-18]。为比较不同界面设计对PA6微观结构的影响，在298 K下对PA6、SiO_2/PA6、KH-550/PA6与SiO_2(KH-550)/PA6体系进行自由体积分布可视化与定量统计。图5为不同体系的自由体积(V_f)分布。从图5可以看出，PA6体系中自由体积空穴数量较多且局部呈连通特征，表明体系存在较明显的“空隙通道”；加入KH-550或SiO_2后，空穴明显减少并趋于离散，其中SiO_2的填充作用使较大空穴被分割为更细小的孤立空穴；当Nano-SiO_2进一步经KH-550功能化后，空穴数量与尺度降至最低，说明强界面作用促使链段在填料周围更紧密堆砌，抑制界面区域的空隙富集[19]。F的计算公式为：

$$F=\frac{V_f}{V_o+V_f} \tag{1}$$

式(1)中：F为自由体积分数，%；V_f为体系自由体积，nm^3；V_o为占有体积，10^{-5} nm^3。

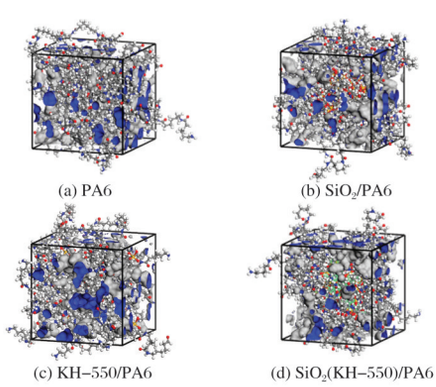


图5 不同体系的V_f分布

Fig.5 V_f distribution of different systems

表2为不同体系的V_o、V_f和F。从表2可以看出，PA6体系的V_f为0.280 6 nm^3，F为15.78%；SiO_2(KH-550)/PA6体系的V_f最小，为0.215 8 nm^3，F为12.13%，相对PA6体系的F下降约23.1%。尽管V_o略有增加，但V_f与F持续降低，表明结构致密化主要来自填料填充与界面耦合引起的局部重排。总体上看，自由体积由“连通-富集”向“离散-缩小”转变，意味着迁移空间与通道被压缩。

表2 不同体系的V_o、V_f及F

Tab.2 V_o, V_f and F of different systems

体系	V_O/(10^{-5} nm^3)	V_f/nm^3	F/%
PA6	1.498 4	0.280 6	15.78
KH-550/PA6	1.516 8	0.262 2	14.74
SiO_2/PA6	1.539 3	0.239 7	13.47
SiO_2(KH-550)/PA6	1.563 2	0.215 8	12.13

均方位移可直接反映聚合物链段的迁移与松弛能力，是衡量体系动力学活性、扩散通道及结构约束强弱的重要指标[20]。在298 K下研究不同体系均方位移随时间的变化规律，图6为不同体系的均方位移。从图6可以看出，各体系在初始阶段(约0~5 ps)均方位移快速上升，随后进入相对平缓的增长区间，表明链段由局域振动逐步过渡到受限扩散过程。相比PA6，加入SiO_2或KH-550后，均方位移曲线整体下移，说明填料的填充作用与界面相互作用的增强，共同限制了链段运动。其中，KH-550/PA6曲线在全时间下移幅度最大，说明引入偶联剂后链段受到更强的束缚作用。SiO_2/PA6体系与SiO_2(KH-550)/PA6体系在中前期差异较小，但在约80 ps以后，均出现更明显的上升。这说明在长时间下，SiO_2(KH-550)/PA6可能发生更强的协同松弛或局部结构重排。结合自由体积结果可知，功能化SiO_2体系虽具有更低的F，但其链段运动呈现一定的时间依赖性，可能与“界面层强约束-体相链段相对可动”的动力学非均匀有关[21]。

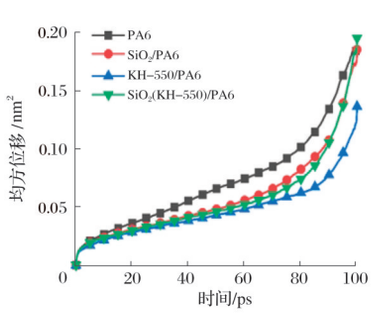


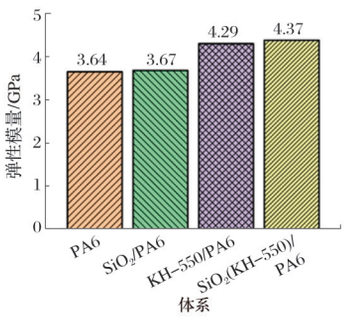
图6 不同体系的均方位移

Fig.6 Mean square displacement of different systems

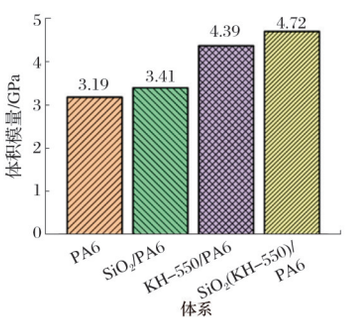
2.4 力学性能分析

弹性模量与体积模量分别能够反映材料对拉伸变形与体积压缩的抵抗能力，可用于评估界面增强与结构致密化对PA6承载性能的贡献[22]。图7为不同体系弹性模量及体积模量。从图7可以看出，PA6体系的弹性模量为3.64 GPa。加入SiO_2后，SiO_2/PA6体系的弹性模量仅增至3.67 GPa，说明在界面作用较弱时，填料刚性难以有效转化为拉伸传载增益。引入KH-550后，KH-550/PA6体系弹性模量显著提升至4.29 GPa，SiO_2(KH-550)/PA6体系弹性模量进一步升至4.37 GPa，表明强界面耦合可抑制链段滑移并提高应力传递效率[23]。体积模量对结构致密程度更为

敏感。PA6、SiO_2/PA6、KH-550/PA6、SiO_2(KH-550)/PA6体系的体积模量分别为3.19、3.41、4.39、4.72 GPa。SiO_2(KH-550)/PA6体系的体积模量增幅最大。SiO_2(KH-550)/PA6体系在弹性模量与体积模量上均表现最优，其提升趋势与界面结合能绝对值增大、氢键数量增加及F降低的结果相一致，说明功能化界面增强+结构致密化是PA6力学性能提升的主要原因。



(a) 弹性模量



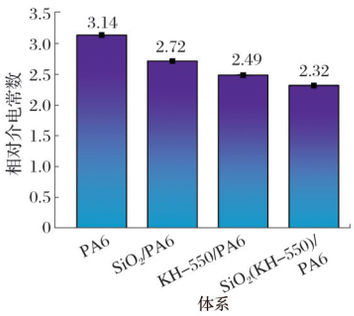
(b) 体积模量

图7 不同体系的弹性模量及体积模量

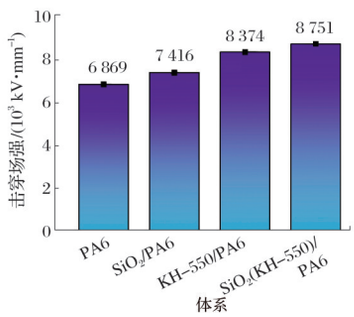
Fig.7 Elastic modulus and bulk modulus of different systems

2.5 电绝缘性能分析

相对介电常数能够反映介质极化能力，击穿场强能够表征材料在强电场下的绝缘失效阈值[24-25]。图8为不同体系的相对介电常数及击穿场强。从图8可以看出，随着改性程度的增强，相对介电常数呈单调下降趋势。PA6、SiO_2/PA6、KH-550/PA6及SiO_2(KH-550)/PA6的相对介电常数分别为3.14、2.72、2.49和2.32。该趋势表明纳米填料与偶联剂引入后，链段取向与偶极松弛受到更强的约束，体系有效极化能力降低，这与F下降、氢键网络增强与均方位移减小所反映的链段受限行为一致。击穿场强随着改性程度的增强呈单调上升趋势。PA6、SiO_2/PA6、KH-550/PA6及SiO_2(KH-550)/PA6的击穿场强分别为6 869×10^3、7 416×10^3、8 374×10^3、8 751×10^3 kV/mm。击穿场强提高的原因是界面相互作用增强与结构致密化的共同作用。一方面，功能化界面能够提升界面结合与载荷/电荷的传递稳定性，抑制界面缺陷诱导的局部场强畸变；另一方面，自由体积减少与氢键增多削弱电荷迁移通道，限制链段热运动，从而降低导电与热失稳风险。SiO_2(KH-550)/PA6在降低相对介电常数的同时实现击穿场强的显著提升，体现出“界面强化-链段约束-绝缘裕度提升”的协同调控效果。



(a) 相对介电常数



(b) 击穿场强

图8 不同体系的相对介电常数及击穿场强

Fig.8 Relative dielectric constant and breakdown strength of different systems

3 结论

基于PA6、SiO_2/PA6、KH-550/PA6与SiO_2(KH-550)/PA6四类模型体系，从“界面作用-微观结构-链段动力学-力学性能”出发，结合自由体积可视化与统计、均方位移、界面结合能、氢键、$g(r)$、弹性模量、体积模量、相对介电常数及击穿场强等结果，系统揭示了功能化Nano-SiO_2界面设计对PA6复合材料电绝缘性能和力学性能协同调控的内在机制。结果表明：界面增强是性能协同提升的起点。SiO_2/PA6体系界面作用较弱；SiO_2(KH-550)/PA6体系的界面稳定性与传载能力最优。氢键网络与短程有序增强形成界面束缚层。SiO_2(KH-550)/PA6氢键数量由66增至112且平均距离缩短，局部堆砌，短程有序性提高，而PA6骨架结构保持不变，说明功能化SiO_2可构建更稳定的界面作用网络。结构致密化与链段受限共同削弱迁移通道。改性使PA6体系自由体积空穴减少并由连通趋于离散，SiO_2(KH-550)/PA6体系的F由15.78%降至12.13%。改性使均方位移整体降低，说明链段迁移空间被压缩。改性使力学性能与电绝缘性能同步优化，其中SiO_2(KH-550)/PA6体系最优。SiO_2(KH-550)/PA6体系的弹性模量与体积模量分别提升至4.37 GPa与4.72 GPa；相对介电常数由3.14降至2.32，同时击穿场强由6 869×10^3 kV/mm升至8 751×10^3 kV/mm，体现“界面强化→氢键网络增密→自由体积压缩→链段受限”的作用机理。

KH-550功能化Nano-SiO_2通过构建强界面耦合与界面束缚层，诱导PA6链段在界面附近发生更紧密的堆砌与相互作用重排。一方面，PA6体系的自由体积被压缩、迁

移通道被削弱，链段取向与松弛受到抑制，从而降低相对介电常数，提高击穿场强；另一方面，PA6体系的界面黏结与载荷传递效率提高，使材料对拉伸与体积压缩的抗力同步增强。上述结果表明，功能化界面设计是实现PA6复合材料电绝缘性能与力学性能协同提升的有效策略。其中SiO_2(KH-550)/PA6体系综合表现最佳，可为后续配方筛选、填料分散与界面层结构优化提供参考。

参考文献

[1] XIA G W, XIE J, SONG Y Z, et al. Inhibited the dampness deterioration of GFRP insulation by depositing DBD/AFS co-fluorinated nano-SiO_2 functional layer on the GF surface[J]. Composites Science and Technology, 2025, 261: 111019.

[2] LIU H Y, ZHAN S Q, BO Y Y, et al. Preparation and application of high sound insulation polyurethane composite film through glass fiber reinforcement[J]. Journal of Applied Polymer Science, 2024, 141(7): e54960.

[3] 康鹏, 辛琦, 徐凯, 等. 高性能长玻璃纤维增强聚丙烯复合材料制备关键技术及其在汽车轻量化中的应用[J]. 石油化工, 2025, 54(10): 1416-1424.

[4] 刘莉莉, 刘水平, 刘涛, 等. 500 kV变电站并联电容器补偿装置用大容量干式空心串联电抗器研制[J]. 电力电容器与无功补偿, 2025, 46(4): 58-64.

[5] 张翀, 王博, 崔惠泽, 等. 不同增韧剂对干式变压器用环氧树脂的力学性能影响及仿真分析[J]. 绝缘材料, 2025, 58(12): 30-38.

[6] 陆庆珩, 陈林, 李逢, 等. 纳秒脉冲下去离子水中固体绝缘材料沿面闪络特性[J]. 强激光与粒子束, 2025, 37(8): 118-126.

[7] 刘玉健. 抗氧剂MAE接枝改性XLPE绝缘材料耐水树性能研究[D]. 哈尔滨: 哈尔滨理工大学, 2023.

[8] WANG Y Q, ZENG Z, GAO M, et al. Hygrothermal aging characteristics of silicone-modified aging-resistant epoxy resin insulating material[J]. Polymers, 2021, 13(13): 2145.

[9] YANG Y, MA J L, YAP M, et al. Electrical properties and lifetime prediction of an epoxy composite insulation material after hygrothermal aging[J]. Polymers, 2023, 15(8): 1942.

[10] WANG X S, ZHAO T, WANG Y H, et al. Physical property and interface binding energy calculation of polyimide/boron nitride nanosheets thermally conductive composite insulating materials[J]. Computational Materials Science, 2022, 210: 111051.

[11] YANG J S, YANG C L, WANG M S, et al. Effect of functionalization on the interfacial binding energy of carbon nanotube/nylon 6 nanocomposites: A molecular dynamics study[J]. RSC Advances, 2012, 2(7): 2836.

[12] 刘道生, 陈欣, 王海彬, 等. 基于分子动力学模拟的电-热耦合作用下改性纤维素纸结晶区老化机理[J]. 高电压技术, 2026, 52(3): 1373-1383.

[13] YANG C G, CHEN C, TAO D C, et al. Facile design of nanofiber composite film with multi-level crosslinked enhanced structure using carbon nanotubes/silver-coated nylon 6 as microwave absorber[J]. Chemical Engineering Journal, 2025, 507: 160188.

[14] MATSUDA Y, OKUDA K, TASAKA S. Interfacial phase of nylon 6 strongly adsorbed on alumina particles[J]. Polymer Journal, 2020, 52(9): 1121-1127.

[15] 殷子洛, 朱泉峣, 李凯, 等. 聚丙烯纤维增强交联聚苯乙烯的介电及力学性能研究[J]. 材料导报, 2026, 40(1): 234-239.

[16] QIU L, ZHU N, FENG Y H, et al. Interfacial thermal transport properties of polyurethane/carbon nanotube hybrid composites[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2020, 152: 119565.

[17] OHRT C, RÄTZKE K, OSHIMA N, et al. Free volume profiles at polymer-solid interfaces probed by focused slow positron beam[J]. Macromolecules, 2015, 48(5): 1493-1498.

[18] 王成江, 李士兴, 郭志昊, 等. 六方氮化硼改性聚酰亚胺热力学性能与介电性能的分子动力学模拟[J/OL]. 材料导报 ,1-14 [2026-01-29]. https://link.cnki.net/urlid/50.1078.tb.20260124.1705.002.

[19] WEI Y N, ZHANG S Y, LI Q N, et al. Study on the microstructure evolution and the interfacial void closure mechanism of the stainless steel diffusion bonding joints[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2025, 1041: 183780.

[20] YANG J, CUSTER D, CHIANG C C, et al. Understanding the mechanical and viscoelastic properties of graphene reinforced polycarbonate nanocomposites using coarse-grained molecular dynamics simulations[J]. Computational Materials Science, 2021, 191: 110339.

[21] ZHANG J W, WANG D W, WANG L J, et al. Effect of terminal groups on thermomechanical and dielectric properties of silica-epoxy composite modified by hyperbranched polyester[J]. Polymers, 2021, 13(15): 2451.

[22] YANG G, CUI J Z, ZENG K W, et al. Continuous construction of gradient modulus interphase in CF/PA6 composites with enhanced interfacial properties and reduced porosity[J]. Composites Science and Technology, 2025, 272: 111392.

[23] ZHOU J L, WANG Q Q, JIA C, et al. Molecular weight discrete distribution-induced orientation of high-strength copolyamide fibers: Effects of component proportion and molecular weight[J]. Macromolecules, 2021, 54(16): 7529-7539.

[24] BANNON S M, FETTER R L, FREGER V, et al. The influence of ion solvation and association interactions on mean ionic activity coefficients in neutral polymeric membranes[J]. Macromolecules, 2025, 58(22): 12388-12403.

[25] ZHANG J H, LU W M, HAO R, et al. Microstructure and dielectric properties of $CaCu_3Ti_4O_{12}$ ceramics with high breakdown field strength prepared via polymer pyrolysis[J]. Materials Research Bulletin, 2022, 155: 111946.