

六方氮化硼纳米掺杂增强环氧树脂热学和力学性能的分子动力学模拟

王成江, 周文戟, 范正阳, 赵宁
(三峡大学 电气与新能源学院, 湖北 宜昌 443002)

摘要: 建立纯环氧树脂模型和h-BN/EP复合模型,通过分子动力学方法分别计算h-BN纳米掺杂前后环氧树脂的热学、力学以及介电性能指标,并研究不同含量h-BN掺杂对环氧树脂性能的影响。结果表明:当h-BN质量分数在4%~5%时,环氧树脂的热导率、热稳定性有所提升,刚性和韧性增强了10%以上,同时相对介电常数可达最低值1.236,保持了良好的介电性能。

关键词: h-BN; 纳米掺杂; 环氧树脂; 热学性能; 力学性能

中图分类号: TM215 文献标志码: A 文章编号: 1009-9239(2021)01-0078-06

DOI: 10.16790/j.cnki.1009-9239.im.2021.01.014

Molecular Dynamics Simulation on Thermal and Mechanical Properties of h-BN Nano-doping Enhanced Epoxy Resin

WANG Chengjiang, ZHOU Wenji, FAN Zhengyang, ZHAO Ning
(College of Electrical Engineering and New Energy, China Three Gorges University,
Yichang 443002, China)

Abstract: A pure epoxy resin model and an h-BN/EP composite model were established. The thermal, mechanical, and dielectric property of epoxy resin before and after h-BN nano-doping were calculated by molecular dynamics method. And the effect of different h-BN doping content on the properties of epoxy resin was studied. The results show that when the mass fraction of h-BN is 4%–5%, both the thermal conductivity and thermal stability of epoxy resin increase, the rigidity and toughness increase by more than 10%, and the relative dielectric constant reaches the minimum value about 1.236, indicating that the material maintains good dielectric property.

Key words: h-BN; nano-doping; epoxy resin; thermal property; mechanical property

0 引言

大多数气体绝缘金属封闭开关设备(GIS)中的盆式绝缘子是由环氧树脂(EP)浇注而成,但由于其长期工作在高压差、高温差、强电场的环境下,常会导致绝缘设备发生故障。周义博等^[1]根据现场GIS设备内部气体泄漏情况分析得出,设备内部的盆式绝缘子机械强度不够,在不均匀受力和长期内外压差的作用下绝缘子发生破裂,从而导致设备内部SF₆绝缘气体泄漏和绝缘性能降低。金虎等^[2]发现,

近年来发生的多起绝缘故障是由GIS内部触头过热引起的。在直流工况下,表面电荷积聚严重,特别是在极性反转等条件下,由于合成电场的叠加效应,闪络电压会大幅下降,威胁GIS/GIL的安全运行^[3]。因此,在保证介电性能的前提下,增强绝缘子环氧树脂材料的热学和力学性能尤为重要。

近年来,许多研究者对增强绝缘材料的热学和力学性能进行了研究。杜伯学等^[4]发现向聚乙烯中掺杂氮化硼,可以提升聚乙烯的导热性能、耐电弧性能和介电性能;马万里等^[5]分别将纳米氮化硼和微米氮化硼掺入环氧树脂中制备复合材料,发现纳米氮化硼对环氧树脂热导率及电气性能的提升高于微米氮化硼。六方氮化硼(h-BN)由于化学性质稳定、膨胀系数低、热导率高等特性,常被用作掺杂

收稿日期:2020-03-17 修回日期:2020-04-18

基金项目:国家自然科学基金资助项目(51577105)

作者简介:王成江(1971-),男(汉族),湖北宜昌人,教授,主要从事高电压与绝缘的研究。

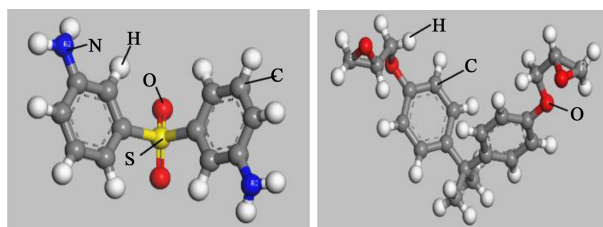
填料,用于制备性能更加优良的聚合物复合材料^[6-7]。杨曦等^[8]制备了聚酰亚胺/h-BN复合材料,发现掺杂h-BN能够有效提高材料的热导率及热稳定性。现有研究大多通过制备h-BN复合材料从宏观层面进行性能分析,较少有人通过分子动力学仿真研究h-BN掺杂比例对h-BN/EP复合材料的影响,且当h-BN的掺杂尺寸达到纳米级别时,从宏观层面难以全面揭示纳米粒子的作用机理^[9]。

分子模拟技术由于其考察微观尺度的特点,在纳米材料的微观研究方面有着独特的优势^[10-11]。本研究通过分子模拟建模和分子动力学计算,从微观层面探究h-BN纳米掺杂对环氧树脂绝缘材料热学性能、力学性能及介电性能的影响,计算分析复合材料中h-BN掺杂比例、均方位移与拉伸模量等微观指标之间的关系,并从微观角度分析和解释影响机理,为h-BN纳米掺杂环氧树脂复合材料的研制提供理论指导。

1 h-BN 掺杂与建模

选用GIS设备中盆式绝缘子常用的环氧树脂单体双酚A二缩水甘油醚(DGEBA)和固化剂3,3'-二氨基二苯砜(DDS)建立纯环氧树脂交联模型。

首先,分别建立DGEBA和DDS的单体分子模型,再通过分子动力学模块对单体分子进行能量最小化计算(总步数为5 000步,步长为1 fs),得到最低能量的分子模型,如图1所示,其中DGEBA单体分子上的环氧基团与DDS上的氨基基团是环氧树脂与胺类固化剂发生固化反应的主要基团。



(a)DDS结构

(b)DGEBA分子结构

图1 单体分子结构

Fig.1 Monomer molecular structure

其固化过程中主要包含两个反应,反应机理如图2所示。首先,环氧基开环与固化剂上的伯胺基团加成反应生成仲胺;然后,环氧基团开环与仲胺基团反应生成叔胺,氧原子与氢原子反应生成羟基。

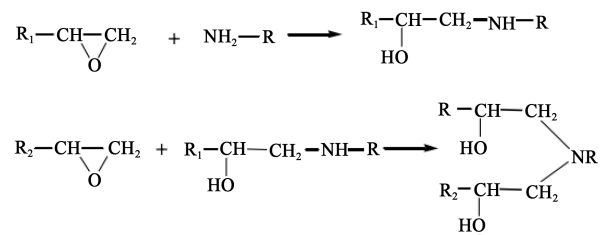


图2 固化主要反应式

Fig.2 Main reaction formula for curing

将参与主要反应的环氧基团中C原子的名称改为R₁,氨基基团中N原子的名称改为R₂,以便于编辑交联perl脚本;接着建立由32个DGEBA分子和16个DDS分子(环氧基团和氨基的比例为2:1)组成的初始密度为0.6 g/cm³的无定型分子模型,随后对此模型进行结构优化。

经过能量最小化处理后的DGEBA/DDS无定型结构混合物通过固化反应进行交联,形成指定交联程度的环氧树脂模型。通过perl脚本自动在发生固化反应的原子间连接化学键,以构成交联环氧树脂的模型。

交联脚本运作的主要原理是在模拟过程中判断R₁和R₂之间的距离,若距离在脚本中设置的截断半径范围之内且原子之间无阻拦时,则连接DGEBA单体与DDS单体。截断半径作为反应基团之间能否交联的核心判据,取其初始值为3.5 Å,最大值为7.0 Å。预设步长为0.5 Å,反应温度为400 K。理想状况下,官能团反应完全,环氧树脂模型交联度为100%,而现实中的交联度一般在80%~95%,因此本模型中将交联度设置为85%。

通过运行脚本得到交联后的环氧树脂模型,接着对此模型进行分子动力学模拟,先在恒温恒体积系综下对整个模型进行一次平衡,随后选择恒温恒压系综再次进行平衡。两次模拟均将温度设置为300 K,步长设为0.5 fs,模拟时间设为100 ps,压强设为1 atm,得到DGEBA/DDS交联物模型,如图3(a)所示,并将此模型作为h-BN掺杂前的交联环氧树脂模型。

再建立氮化硼的单体分子模型,进而建立出最小的h-BN晶胞,将此晶胞掺入DGEBA/DDS交联物模型中,得到h-BN掺杂后的环氧树脂模型,如图3(b)所示。

将h-BN掺杂的质量分数分别控制在0、1.0%、2.0%、2.9%、3.9%、4.3%、4.8%、5.2%、6.1%、7.0%、7.8%、9.1%,得到12组环氧模型,在恒温恒压系综下

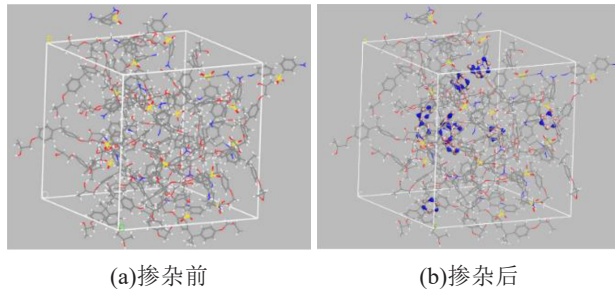


图3 h-BN掺杂前后环氧树脂模型

Fig.3 Epoxy resin model before and after h-BN doping

保持 298 K 动力学弛豫 400 ps, 使模型更加接近真实状态。再让模型在恒温恒体积系综下保持 298 K 动力学弛豫 700 ps, 作为后期计算的初始模型。

2 h-BN 掺杂对热学性能的影响

2.1 热导率

热导率是反映物质热传导能力的重要指标, 其定义为单位温度梯度在单位时间内经单位导热面所传递的热量。热导率越大说明物体的导热能力越强, 散热性能越好。

目前, 运用分子动力学研究纳米复合材料热学性质的方法主要为平衡分子动力学和非平衡分子动力学^[12-13]。平衡分子动力学方法可用较小的模拟尺寸得到无穷大体系的热导率, 但是采用此方法计算通量相关函数的时间积分时, 收敛性较差, 并且存在多组分系统的微观热通量定义模糊等问题^[14-15]。

非平衡分子动力学方法是在模拟系统中设置两个温度不同的区域, 使添加到热区的能量等于从冷区移除的能量, 并且与两个区域之间传递的热流呈比例关系。通过周期性交换, 系统在给定的能量通量和温度梯度下达到稳态, 利用 Fourier 定律求解材料的热导率, 如式(1)所示。

$$J = -K\nabla T \quad (1)$$

式(1)中: J 为热通量; K 为热导率; ∇T 为温度梯度。

但非平衡分子动力学方法在模拟过程中没有保证质量守恒, 分子容易变形。F MÜLLER-PLATHE^[16]针对这一问题提出了反扰动非平衡动力学方法(RNEMD), 通过交换模拟体系中不同区域的原子质心速度, 在模拟体系内形成冷热区域, 很好地避免了变形问题。

反扰动非平衡动力学方法的模拟原理如图4所示, 材料的温度为模型的平均温度, 两端为低温层, 中间为高温层。将整个模型平均分为20份, 依次交换高温层中温度最低粒子与低温层中温度最高的

同质量粒子的动能。上述机制产生了从低温层到高温层能量的转移, 这将导致低温层和高温层之间产生温差, 两侧的温差经过热传导将改变中间层的温度, 最终整个系统将达到平衡稳定的状态, 从而得到模型的温度梯度, 形成稳定的热流。此时热导率的计算公式为式(2)^[16]。

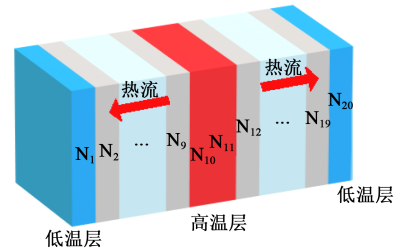


图4 反扰动非平衡分子动力学原理示意图

Fig.4 Schematic diagram of RNEMD principle

$$K = - \frac{\sum_{\text{transfers}} \frac{m}{2} (v_h^2 - v_c^2)}{2tL_x L_y \langle \partial T / \partial z \rangle} \quad (2)$$

式(2)中: t 为模拟时间; v_h 为热粒子速度; v_c 为冷粒子速度; m 为粒子的质量; 式(2)的分子为对所有粒子动能转移的情况求和; $L_x L_y$ 为发生热传递的面积; $\langle \partial T / \partial z \rangle$ 为模型温度梯度。此热导率计算方法通过交换原子的速度矢量构造热流, 很好地保证了系统总动量、总动能和总能量的守恒, 适合用于模拟计算周期性边界条件的体材料的热导率。

环氧树脂在温度高于 450 K 时处于高弹态, 力学性能较玻璃态时大幅降低。而在实际设备中温度高于 450 K 的情况较少, 且当温度达到 500 K 时设备很有可能已经处于故障状态, 故本研究只分析温度为 298~450 K 时材料的热导率。

通过 perl 脚本, 在 298、350、400、450 K 下对 12 个环氧模型的热导率进行了计算, 结果如图5所示。从图5可以看出, 模型的热导率总体为 0.15~0.24 W/(m·K), GU Junwei 等^[17]通过实验得出双酚 A 环氧树脂(E-51)掺杂 BN 的复合材料热导率为 0.20~0.25 W/(m·K), 与本研究数据近似吻合, 证明了数据及 h-BN/EP 复合模型的可靠性。从图5还可以看出, 填充 h-BN 后, 环氧树脂的热导率显著提高, 且随环境温度的升高而升高。分析认为, 在环氧树脂中掺杂的 h-BN 可以填充环氧树脂链段间的空隙, 使整个模型更加紧密, 易形成更多的导热通路。而环境温度的升高将增强 h-BN 的热运动能力, 使 h-BN 更易相互接触结合形成导热网络, 从而提高热

导率。因此,向纯环氧树脂中掺杂 h-BN 纳米颗粒,能够较大幅度提高环氧树脂的热导率,增强其散热性能。

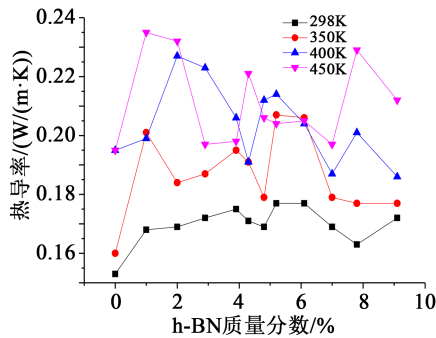


图5 不同温度下h-BN 掺杂环氧树脂的热导率
Fig.5 Thermal conductivity of h-BN doped epoxy resin at different temperatures

2.2 均方位移(MSD)

MSD 是反映高分子链段运动能力的重要参数,能够表征材料整体的热稳定性^[18]。MSD 在一定温度下随着 h-BN 掺杂量的变化可以间接反映不同 h-BN 掺杂比例环氧树脂分子链段的运动剧烈程度。其值越大,链段运动越剧烈,环氧树脂整体的热稳定性就越差。均方位移的定义如式(3)所示。

$$MSD = \left\langle \left| \mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(0) \right|^2 \right\rangle \quad (3)$$

式(3)中: $\mathbf{r}_i(t)$ 表示 t 时刻环氧树脂分子链中 i 原子的位置向量; $\mathbf{r}_i(0)$ 表示零时刻环氧树脂分子链中 i 原子的位置向量。通常认为,随着交联度的增大,环氧树脂体系的 MSD 减小,交联反应使得体系的小分子形成网状结构,阻碍了分子链段的运动,使得体系分子链段的整体运动能力下降。而在常温下相同交联度的环氧树脂,掺杂不同质量分数的 h-BN 纳米晶胞也会影响其链段运动能力。图 6 为 298 K 下掺杂不同质量分数 h-BN 的环氧树脂 MSD 曲线。

从图 6 可以看出,掺杂 h-BN 后环氧树脂的 MSD 曲线都位于掺杂前环氧树脂的 MSD 曲线下方。其原因是纳米 h-BN 在一定程度上填充了环氧树脂分子链间的空隙,导致其内部分子的排布变得紧凑,相互间的作用力变大,分子链在热流影响下的 MSD 随即减小。同时,分子振动产生的声子也会减少,声子间的碰撞次数减少,可以提升整体的热导率,这与图 5 中环氧树脂的热导率计算结果相吻合。因此,向环氧树脂中掺杂 h-BN 可以减弱分子链的热运动,使其三维网络结构更加稳定,增强环

氧树脂的热稳定性。

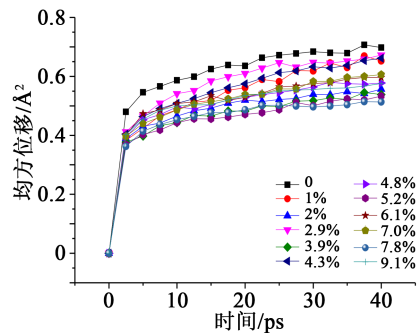


图6 不同质量分数h-BN 掺杂环氧树脂的均方位移
Fig.6 MSD of different mass fractions of h-BN doped epoxy resin

3 h-BN 掺杂对力学性能的影响

通过静态常应变法,在已经平衡的环氧树脂模型中应用一个处于弹性极限内的微小应变,然后进行一次能量优化。施加这个应变到环氧树脂模型不同的方向上,多次重复上述过程,可以运用广义的胡克定律推导出刚度矩阵,即力与位移关系的矩阵。刚度矩阵的元素为势能对应变的二阶导数,如式(4)所示。

$$C_{ij} = \frac{1}{V} \dots \frac{\partial^2 U}{\partial \epsilon_i \partial \epsilon_j} = \frac{\partial \sigma_i}{\partial \epsilon_j} = \frac{\sigma_+ - \sigma_-}{2\epsilon_j} \quad (4)$$

式(4)中: U 为势能; σ 为应力,是单位体积势能对应变的一阶导数,“+”代表拉伸,“-”代表压缩; ϵ 为应变; V 是模型体积。

对于各向同性材料,两个 Lamé 常数定义公式中的 λ 和 μ 可以从刚性矩阵得到, Lamé 常数的定义公式如式(5)~(6)所示,据此可得拉伸模量 E 、柯西压 (C_{12} - C_{44}) 等力学参数。

$$\lambda = \frac{1}{3} (C_{11} + C_{22} + C_{33}) - \frac{2}{3} (C_{44} + C_{55} + C_{66}) \quad (5)$$

$$\mu = \frac{1}{3} (C_{44} + C_{55} + C_{66}) \quad (6)$$

式(5)~(6)中: λ 为 Lamé 第一参数; μ 为 Lamé 第二参数,也是剪切模量。

3.1 拉伸模量

拉伸模量是一个材料常数,为应力与应变的比值,表征材料抵抗弹性形变的能力,其数值越大,相同的应变就要用更大的应力来保持,材料的刚性越好。拉伸模量的定义^[19]如式(7)所示。

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

将每组模型在恒温恒体积系综下以 298 K 的温度运行 50 ps, 运行 10 遍分别计算出其拉伸模量, 再对每组模型得到的 10 个拉伸模量取平均值绘图, 结果如图 7 所示。从图 7 可以看出, 掺杂前环氧树脂的拉伸模量为 4.71 GPa, 而文献[20]中 DGEBA/DDS 环氧树脂拉伸模量的实验数据约为 4.50 GPa, 仿真与实验结果存在 0.21 GPa 的误差是由于环氧树脂模型交联程度与实验实际情况不能保持完全一致, 与实验数据近似的仿真值证明了纯环氧模型以及数据的可靠性。

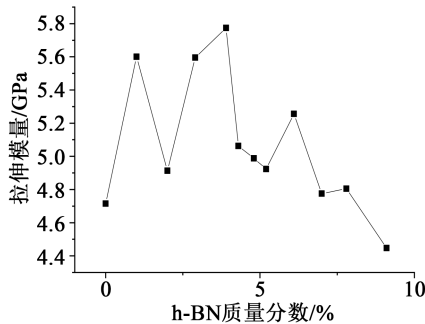


图 7 h-BN 掺杂环氧树脂的拉伸模量

Fig.7 Tensile modulus of h-BN doped epoxy resin

从图 7 还可以看出, 随着 h-BN 掺杂量的增加, h-BN/EP 复合材料的拉伸模量呈先增大后减小的趋势, 在 h-BN 质量分数为 3.9% 时, 拉伸模量达到最大值 5.77 GPa, 较掺杂前增大了 22.5%。这是由于纳米 h-BN 晶胞的粒径小, 比表面积大, 通过其与环氧树脂分子链进行充分的吸附、键合, 增强了 h-BN 与环氧基体的界面粘附, 这有利于整个体系的应力传递, 增强了环氧树脂承担载荷的能力。但如果掺杂的 h-BN 超过一定量, h-BN/EP 复合材料在力的作用下会生成更多的银纹, 降低环氧树脂的力学性能。因此, 适量 h-BN 的掺杂可以提高环氧树脂的拉伸模量, 增强其抗形变能力, 即增强环氧树脂的刚性。

3.2 柯西压

柯西压 ($C_{12}-C_{44}$) 一般用于衡量材料的延展性, 若为负值则表明材料偏脆, 若为正值则表明材料的延展性较好, 其值越大则表明材料的延展性越好。

将每组模型在恒温恒体积系综下以 298 K 的温度运行 50 ps, 运行 10 遍分别计算出其柯西压, 再对每组模型得到的 10 个柯西压取平均值作图, 结果如图 8 所示。从图 8 可以看出, 掺杂 h-BN 前环氧树脂的柯西压为 1.639, 随着 h-BN 掺杂量的增加, h-BN/EP 复合材料的柯西压整体上呈先减小后增大、再减小的趋势。当 h-BN 掺杂质量分数为 5.2% 时, h-BN/EP 复合材料的柯西压达到最大值 1.87, 较掺杂前增

强了 12.6%。而当 h-BN 掺杂质量分数大于 5.2% 时, h-BN/EP 复合材料的柯西压随着 h-BN 掺杂量的增加有所减小。分析认为, 在外力的作用下, 纳米 h-BN 与环氧基体之间会产生银纹, 吸收外界的能量。同时 h-BN 之间的环氧基体也会吸收能量进行塑性形变。由此可得, 向环氧树脂中掺杂一定质量分数的 h-BN 能增强其延展性, 但 h-BN 超过一定掺杂量时银纹的增多可能发展成为宏观的破裂现象。因此, 向环氧树脂中掺杂适量 h-BN 时可以增强其延展性。

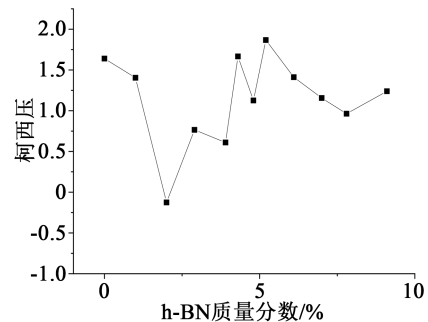


图 8 h-BN 掺杂环氧树脂的柯西压

Fig.8 Cauchy pressure of h-BN doped epoxy resin

4 h-BN 掺杂对介电性能的影响

向环氧树脂中掺杂纳米颗粒会对整体的介电性能有所影响^[21]。介电常数作为评判材料介电性能的重要指标, 能够体现电介质对外部电场的响应过程。因此有必要探究 h-BN 掺入对环氧树脂相对介电常数的影响。

将每个固定电荷模型在恒温恒体积系综下以 298 K 的温度运行 50 ps, 每组模型计算 10 遍, 再将每组模拟计算中整个体系的偶极矩分别记录下来。相对介电常数计算公式如式(8)所示^[22]。

$$\varepsilon = 1 + \frac{1}{3Vk_B T \varepsilon_0} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) \quad (8)$$

式(8)中: M 是体系在一个时间步的偶极矩; $\langle M^2 \rangle$ 是对体系运行轨迹中的每一个采样的偶极矩依次平方后求和再平均; $\langle M \rangle^2$ 是对体系轨迹中所有采样的偶极矩平均后再平方; V 是体积; T 是热力学温度; k_B 是玻尔兹曼常数; ε_0 是真空介电常数。通过公式计算得到每组模型的 10 个相对介电常数。

图 9 是掺杂 h-BN 前后环氧树脂的相对介电常数, 其中黑点为每组模型计算 10 次的相对介电常数散点图, 点线图根据每组模型的 10 个相对介电常数的平均值所作。

从图 9 可以看出, h-BN/EP 复合材料的相对介

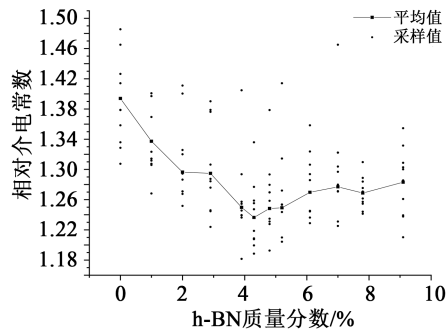


图9 h-BN掺杂环氧树脂的相对介电常数

Fig.9 Dielectric constant of h-BN doped epoxy resin

电常数随着h-BN质量分数的增加整体呈现先降低后升高的趋势,当质量分数为4.3%时,介电常数达到最小值1.236。这是由于掺入的少量h-BN与环氧树脂基体之间的界面效应会使高分子链段与h-BN表面发生键合,限制了极性基团的转向运动和在环氧树脂内部的运输,减小了整个体系的偶极矩波动,即在外电场作用下环氧树脂不容易被极化,这意味着材料有较小的相对介电常数。而继续升高h-BN质量分数至9%,复合材料的相对介电常数呈上升趋势。其原因是大量的h-BN掺杂会在环氧树脂内部发生团聚,团聚区域的极性较大,故h-BN/EP复合材料整体的相对介电常数上升。

刘志民等^[23]推导得到非均匀介质稳态时表面电荷密度公式,总结出介电常数较高的固体介质表面比较容易积聚电荷。因此当掺杂h-BN的质量分数为4.3%时,环氧树脂具有最小的相对介电常数,能够减小电场对绝缘材料极化的影响,减少材料表面电荷集聚的现象。

5 结论

(1)向纯环氧树脂中掺杂h-BN纳米颗粒,能够较大幅度提高环氧树脂的热导率,增强其散热性能。一定量的h-BN纳米掺杂可以减少环氧树脂分子链的热运动,增强h-BN/EP复合材料的热稳定性。

(2)当h-BN掺杂量在4%~5%时,能增强环氧树脂的力学性能,力学性能较掺杂前增强了10%以上,同时能够保持良好的介电性能。

(3)h-BN纳米掺杂可以增强环氧树脂的热学和力学性能,说明h-BN/EP复合材料可用于高压差、高温差环境下的绝缘和支撑。

参考文献:

[1] 周义博,万四维,曾宪文,等. 一起220kV GIS漏气及盆式绝缘子破裂原因分析[J]. 广东电力,2012,25(9):118-121.
 [2] 金虎,彭在兴,刘凯,等. 基于温度梯度法的GIS内部过热试验研究及应用[J]. 电子世界,2017(23):33-34.

[3] 孙秋芹,罗宸江,汪飒,等. 特高压GIS盆式绝缘子沿面闪络特性研究综述[J]. 高压电器,2018,54(5):17-25,32.
 [4] 杜伯学,崔彬,徐航,等. 聚乙烯/氮化硼高导热复合材料的耐电弧性和介电性能[J]. 高电压技术,2018,44(5):1412-1420.
 [5] 马万里,田付强,熊雯雯,等. 环氧树脂/氮化硼纳米复合材料的导热与电气绝缘性能研究[J]. 绝缘材料,2019,52(7):36-42.
 [6] 丁纪恒,RAHMAN O,豆慧敏,等. 生物基六方氮化硼分散液在环氧复合材料中的应用[J]. 功能材料,2018,49(1):1156-1162.
 [7] 高宇飞,孟庆元,张璐,等. 氮化硼纳米管热输运性能的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报,2012,28(5):1077-1084.
 [8] 杨曦,姚亚超,张伯涵,等. 高导热聚酰亚胺/氮化硼复合材料的制备与表征[J]. 胶体与聚合物,2016,34(1):19-21.
 [9] 曹了然,张春煜,张鼎林,等. 分子动力学模拟技术在生物分子研究中的进展[J]. 物理化学学报,2017,33(7):1354-1365.
 [10] 李亚莎,章小彬,黄太焕,等. 潮湿环境下二氧化硅掺杂交联聚乙烯的分子动力学模拟[J]. 分子科学学报,2019,35(3):209-215.
 [11] 寇正. 分子模拟技术在高电压绝缘领域的应用浅析[J]. 内燃机与配件, 2018(10):228-229.
 [12] LOU Zhaoyang, YANG Mingli. Molecular dynamics simulations on the shear viscosity of Al₂O₃ nanofluids[J]. Computers & Fluids,2015,117:17-23.
 [13] KANG Hongbo, ZHANG Yuwen, YANG Mo, et al. Nonequilibrium molecular dynamics simulation of coupling between nanoparticles and base-fluid in a nanofluid[J]. Physics Letters A, 2012,376(4):521-524.
 [14] AIMOLI C G, MAGINN E J, ABREU C R A. Transport properties of carbon dioxide and methane from molecular dynamics simulations[J]. The Journal of Chemical Physics,2014, 141(13): 134101.
 [15] BEDROV D, SMITH G D. Thermal conductivity of molecular fluids from molecular dynamics simulations: Application of a new imposed-flux method[J]. The Journal of Chemical Physics, 2000,113(18):8080-8084.
 [16] MÜLER-PLATHE F. A Simple nonequilibrium molecular dynamics method for calculating the thermal conductivity[J]. The Journal of Chemical Physics,1997,106(14):10.1063/1.473271.
 [17] GU Junwei, ZHANG Qiuyu, DANG Jing, et al. Thermal conductivity epoxy resin composites filled with boron nitride[J]. Polymers for Advanced Technologies,2012,23(6):1025-1028.
 [18] 林也平,刘伟帅,苗瑞珍,等. 支链对高分子链导热性能影响的分子动力学模拟[J]. 分子科学学报,2014,30(2):147-152.
 [19] 吴超富. 交联环氧树脂的分子模拟研究[D]. 长沙:湖南大学, 2007.
 [20] WAN Jintao, ZHAO Jianqing, GAN Bin, et al. Ultrastiff bio-based epoxy resin with high T_g and low permittivity: From synthesis to properties[J]. ACS Sustainable Chemistry & Engineering,2016,4(5):2869-2880.
 [21] 律方成,吴晗,阚宇强,等. 纳米SiO₂对双酚A环氧树脂材料介电常数与直流闪络电压的影响[J]. 绝缘材料,2019,52(9):18-24.
 [22] GEREBEN O, PUSZTAI L. On the accurate calculation of the dielectric constant from molecular dynamics simulations: The case of SPC/E and SWM4-DP water[J]. Chemical Physics Letters,2011,507(1-3):80-83.
 [23] 刘志民,邱毓昌,冯允平. 对绝缘子表面电荷积聚机理的讨论[J]. 电工技术学报,1999(2):65-68.