

# 改性PEEK复合材料注塑成型分子模拟及冷却收缩特性研究

梁飞铀, 岳晓丽\*

(东华大学机械工程学院, 上海 201620)

**摘要:** 耐磨改性材料可显著改善聚醚醚酮(PEEK)的摩擦学性能,但其引入也会对PEEK复合材料注塑成型脱模后的冷却收缩特性产生影响,进而影响制品的最终质量。因此,文章基于分子动力学模拟方法,提出一种注塑成型全过程的微观模拟方案,旨在探究成型过程中PEEK微观结构演变行为与脱模后冷却收缩特性之间的内在关联,并定量分析聚四氟乙烯(PTFE)和石墨这两种耐磨添加材料对PEEK复合材料脱模后冷却收缩特性的影响规律。结果表明:在成型过程中,熔体的流动取向导致脱模后PEEK在流动方向和垂直流动方向的冷却收缩程度存在显著差异。PTFE和石墨对PEEK复合材料脱模后的冷却收缩特性影响呈相反趋势,PTFE/PEEK复合材料的冷却收缩率随着PTFE含量的增加而增加,而石墨/PTFE/PEEK复合材料的冷却收缩率则随着石墨含量的增加而下降。

**关键词:** 注塑成型;冷却收缩;耐磨改性;改性复合材料;分子动力学模拟

中图分类号: TB332; TQ320.66

文献标志码: A

文章编号: 1005-3360(2026)01-0172-06

DOI: 10.15925/j.cnki.issn1005-3360.2026.01.032

## Molecular Simulation and Cooling Shrinkage Characteristics Study of Injection Molding of Modified PEEK Composites

LIANG Feiyu, YUE Xiaoli\*

(College of Mechanical Engineering, Donghua University, Shanghai 201620, China)

**Abstract:** Wear-resistant modifying materials can significantly improve the tribological properties of polyetheretherketone (PEEK), but their introduction also affects the cooling shrinkage characteristics of PEEK composites after demolding in injection molding, thereby influencing the final quality of the products. Therefore, the paper proposed a microscopic simulation scheme for the entire injection molding process based on molecular dynamics simulation methods, aiming to explore the intrinsic correlation between the evolution of PEEK's microstructure during the molding process and the cooling shrinkage characteristics after demolding, and to quantitatively analyze the influence laws of polytetrafluoroethylene (PTFE) and graphite, two wear-resistant additives, on the cooling shrinkage characteristics of PEEK composites after demolding. The results showed that the flow orientation of the melt during the molding process led to significant differences in the cooling shrinkage degree of PEEK in the flow direction and the direction perpendicular to the flow after demolding. The effects of PTFE and graphite on the cooling shrinkage characteristics of PEEK composites after demolding were in opposite trends. The cooling shrinkage rate of the PTFE/PEEK composites increased with the increase of PTFE content, while the cooling shrinkage rate of the graphite/PTFE/PEEK composites decreased with the increase of graphite content.

**Keywords:** Injection molding; Cooling shrinkage; Wear-resistant modification; Modified composites; MD simulation

聚醚醚酮(PEEK)因其卓越的机械性能、耐高温性和化学稳定性被广泛应用于航空航天、汽车制造和纺织机械等

收稿日期 Submitted date 2025-02-25; 修回日期 Revised date 2025-03-19; 录用日期 Accepted date 2025-04-21

基金项目: 国家重点研发计划课题(2017YFB0309701)

\*联系人, xlyue@dhu.edu.cn

引用本文: 梁飞铀, 岳晓丽. 改性PEEK复合材料注塑成型分子模拟及冷却收缩特性研究[J]. 塑料科技, 2026, 54(1): 172-177.

Citation: LIANG F Y, YUE X L. Molecular simulation and cooling shrinkage characteristics study of injection molding of modified PEEK composites[J]. Plastics Science and Technology, 2026, 54(1): 172-177.

高性能工程领域<sup>[1-3]</sup>。然而,PEEK材料的耐磨性相对不足,限制其在高摩擦、磨损工况中的应用。通常通过引入耐磨改性材料,如聚四氟乙烯(PTFE)、石墨和纳米颗粒等<sup>[4-6]</sup>,可有效改善PEEK的摩擦学性能。注塑成型因其高效、精密的特点,已成为制备高性能PEEK复合材料制品的关键工艺之一<sup>[7]</sup>。然而,由于PEEK的高熔融黏度特性及注塑成型过程中的热-机械耦合效应,制品在脱模后冷却至室温的过程中易产生翘曲变形,进而影响其尺寸精度和服役性能<sup>[8]</sup>。制品的翘曲变形缺陷与材料的冷却收缩特性密切相关<sup>[9-11]</sup>。当添加不同类型和含量的耐磨改性材料对PEEK进行改性时,复合体系的冷却收缩特性会发生变化。因此,深入探究注塑成型过程中材料的行为演化规律,研究耐磨改性材料对PEEK复合体系成型脱模后冷却收缩特性的影响,对提高制品尺寸精度具有重要意义。

对于PEEK和聚丙烯(PP)等半结晶材料,由于玻璃化转变温度低于模具温度,其在脱模后冷却至环境温度时会发生尺寸变化,从而导致翘曲变形<sup>[12]</sup>。SUMMA等<sup>[13]</sup>在研究PEEK注塑件时,观察到冷却过程中聚合物收缩引起的厚度变化。REVILLA-DÍAZ等<sup>[14]</sup>发现,PP注塑件在脱模48 h后尺寸收缩率明显增加。KOŚCIUSZKO等<sup>[15]</sup>也得出类似结论,PP注塑件的收缩率从脱模后168 h的1.59%增至504 h的1.63%。目前,材料冷却收缩特性的研究主要依赖于实验和宏观数值模拟方法。这些方法虽然有效,但实验方法耗时长,成本高,且宏观数值模拟难以揭示微观机制。随着计算机模拟技术的快速发展,分子动力学(MD)模拟已成为研究材料本构行为预测及微观结构演化机制的高效模拟方法。LI等<sup>[16]</sup>构建了PEEK分子模型,并开展单轴拉伸和剪切变形的MD模拟,成功获得了与实验测试值高度吻合的弹性模量。KIM等<sup>[17]</sup>采用MD模拟方法系统研究了温度对聚对苯二甲酸乙二醇酯(PET)共聚物模型热收缩特性的影响。模拟结果表明,PET共聚物的热收缩率在很大程度上取决于热收缩温度。赵子岳<sup>[18]</sup>为研究聚芳醚酮/聚醚醚酮(PAEK/PEEK)在二次成型时的界面扩散行为,利用MD模拟方法计算PAEK/PEEK界面结合能和扩散系数,结果发现二者均随模具温度的升高而增加。

本文针对PEEK在注塑成型过程中的微观结构演化规律及耐磨改性材料对PEEK复合体系脱模后冷却收缩特性调控机制,提出一种注塑成型全过程分子模拟方案,模拟材料在加热、流动、压缩、冷却等关键环节的热力学特性变化,探究成型过程中PEEK材料微观结构演变行为与脱模后冷却收缩特性的内在关联。定量分析不同配比的石墨/PTFE改性材料对PEEK复合体系冷却收缩特性的影响规律,为材料设计与工艺优化提供参考。

## 1 分子动力学模拟

### 1.1 模型构建

本文的分子模型均基于Materials Studio 2019构建。PEEK分子模型由30条PEEK分子链组成,每条分子链包

含10个首尾相连的氧-对亚苯基-氧-对亚苯基的重复单元结构。PTFE分子链由10个四氟乙烯重复单元结构首尾相连组成,根据复合材料中PTFE的质量分数(5%、10%、15%和20%),将相应数量的PTFE分子链与PEEK分子链加入模拟盒中,构建PTFE/PEEK复合材料分子模型。

石墨和石墨烯都具有碳六角形蜂窝晶胞结构,可将石墨分子模型简化为石墨烯片,石墨烯片尺寸为1.229 nm×1.132 nm。根据石墨的质量分数(0.5%、1.0%、2.0%和3.0%),将对应数量的石墨烯片随机添加至模拟盒中,构建石墨/PTFE/PEEK复合材料分子模型。图1为PEEK、PTFE/PEEK和石墨/PTFE/PEEK分子模型,表1为模型的材料组分及配比。

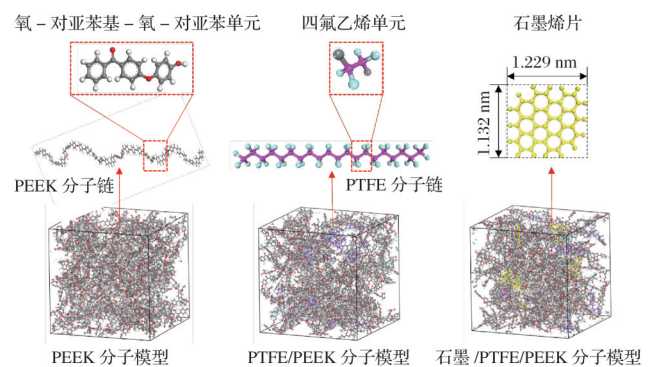


图1 PEEK、PTFE/PEEK和石墨/PTFE/PEEK分子模型

Fig.1 Molecular models of PEEK, PTFE/PEEK, and graphite/PTFE/PEEK

表1 模型的材料组分及配比

Tab.1 Material components and proportions of models

材料组分	PEEK分子链/条	PTFE分子链/条	石墨/片	总原子数
PEEK	30	0	0	10 260
PEEK+5% PTFE	30	5	0	10 570
PEEK+10% PTFE	30	10	0	10 880
PEEK+15% PTFE	30	15	0	11 190
PEEK+20% PTFE	30	21	0	11 562
PEEK+10% PTFE+0.5% 石墨	30	10	1	10 934
PEEK+10% PTFE+1.0% 石墨	30	10	2	10 988
PEEK+10% PTFE+2.0% 石墨	30	10	4	11 096
PEEK+10% PTFE+3.0% 石墨	30	10	6	11 204

### 1.2 模拟过程

分子模型的弛豫平衡模拟和注塑成型全过程的MD模拟均在LAMMPS软件<sup>[19]</sup>中完成,采用适用于聚合物材料体系的一致价力场(CVFF)<sup>[20]</sup>,并在各方向上设置了周期性边界条件。

分子体系的弛豫平衡模拟的具体模拟流程如下:(1)在恒粒子数-恒体积-恒温度(NVT)系综条件下,将体系温度维持在700 K进行1 ns的初始弛豫。(2)转入NPT系综(压力设定为 $1.013 25 \times 10^5$  Pa),以700 K降至300 K,再以300 K回升至700 K的过程作为一个完整周期,重复循环3次,累

计弛豫时长为6 ns。该过程可消除体系中的残余应力,并促进分子结构的充分重组。(3)最后降至300 K,获得常温条件下充分松弛的分子体系。温度和压力控制采用Nos'e-Hoover热浴法<sup>[21]</sup>,非键相互作用的截断半径设为1 nm,时间步长均为1 fs。

PEEK分子体系在温度为300 K平衡状态下的密度为1.31 g/cm<sup>3</sup>,该数值与实验测定值高度吻合<sup>[16]</sup>。这一结果不仅证实了所采用的CVFF力场参数对本文模拟的适用性,同时也验证了模拟方案的合理性。

图2为注塑成型过程模拟方案。从图2可以看出,在熔体阶段(阶段I),PEEK聚合物的熔体温度设置为673 K,此温度处于其常用注塑成型加工温度范围内。熔体在填充流动阶段(阶段II)采用单轴拉伸模拟,沿x轴方向施加固定应变率载荷,使模型达到200%的应变率。由于PEEK为高黏度熔体,其分子链松弛时间较长,高应变率会导致键被拉长、链断裂等现象。因此,为平衡物理合理性和模拟效率,应变速率取 $1 \times 10^{-7} \text{ fs}^{-1}$ 。体系在轴向拉伸过程中,在径向方向自由运动,径向尺寸取决于分子结构和相互作用力。当注射阶段开始时,压力迅速上升,为此,在注射升压阶段(阶段III),将压力从 $1.013 25 \times 10^5 \text{ Pa}$ 升至 $1 480 \times 1.013 25 \times 10^5 \text{ Pa}$ 。在保压阶段(阶段IV)压力保持在 $1 480 \times 1.013 25 \times 10^5 \text{ Pa}$ ,此时,制品的温度降低,将温度从673 K降低至模具温度,即473 K。制品成型后,压力恢复至 $1.013 25 \times 10^5 \text{ Pa}$ 。脱模后,进入冷却收缩阶段(阶段V),体系温度在 $1.013 25 \times 10^5 \text{ Pa}$ 压力下从模具温度降至300 K,模拟制品成型的最终冷却过程,分析由冷却收缩引起的尺寸变化及微观结构演化。

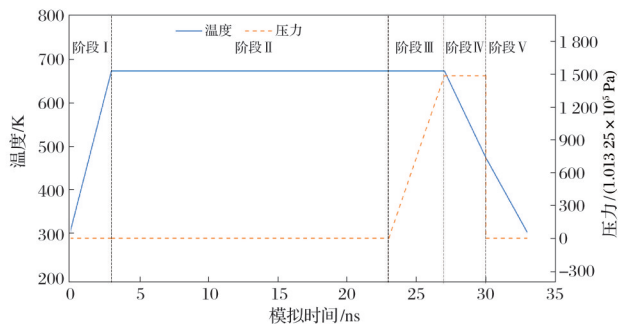


图2 注塑成型过程模拟方案

Fig.2 Simulation program of injection molding process

图3为单轴拉伸过程中键参数的变化。从图3可以看出,相比拉伸前,拉伸后体系的键长数量分布保持稳定,键能基本不变,键能亦无异常增大,确保拉伸过程中键未被拉长、链未发生断裂,验证了采用单轴拉伸模拟方法表征熔体流动状态的合理性。

图4为模拟流动状态单轴拉伸模拟过程中结构参数的变化。从图4可以看出,当应变增加时,体系的回转半径和轴向回转半径分量增加,而径向回转半径分量减小,表明分子链由卷缩状态逐渐向流动方向延伸,对流动

动状态。

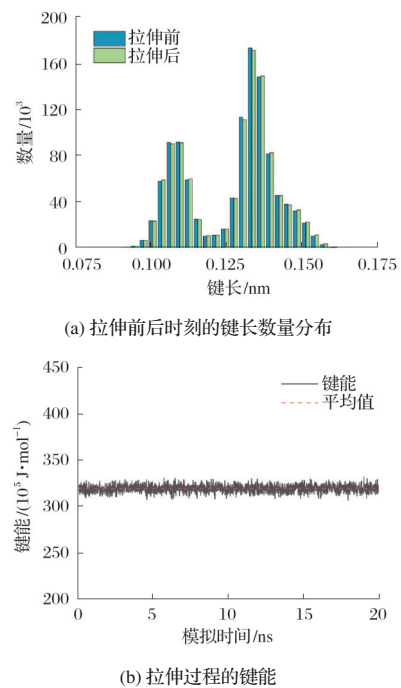


图3 单轴拉伸过程中键参数的变化

Fig.3 Variation of bond parameters during uniaxial stretching

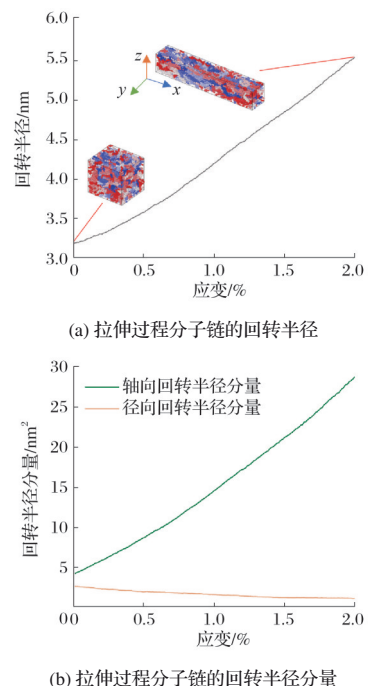


图4 模拟流动状态单轴拉伸模拟过程中结构参数的变化

Fig.4 Variation of structural parameters during uniaxial tensile simulation of simulated flow states

在每个模拟阶段(阶段II除外)结束后,分别在相应结束时刻的条件(温度、压力等状态参数)下进行1 ns的额外平衡模拟。由于势能作为表征体系稳定性的关键指标,因此监测体系势能随时间变化的情况,图5为各阶段结束时刻条件状态下的势能变化。从图5可以看出,势能在平衡过程中均维持稳定状态,确保了后续阶段模拟的初始条件

具有充分的物理意义。

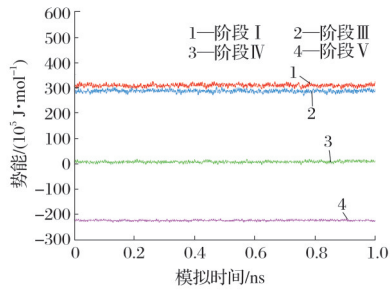


图5 各阶段结束时刻条件状态下的势能变化

Fig.5 Potential energy changes at the end of each stage under conditional states

### 1.3 冷却过程收缩率的计算

为比较 PEEK、PTFE/PEEK 以及石墨/PTFE/PEEK 复合材料在冷却收缩阶段的收缩程度,分别计算从 473 K 降至 300 K 时分子体系的轴向收缩率、径向收缩率及整体收缩率。

横向收缩率计算公式为:

$$S_x = \frac{L_{x0} - L_x}{L_{x0}} \times 100\% \quad (1)$$

轴向收缩率计算公式为:

$$S_y = \frac{L_{y0} - L_y}{L_{y0}} \times 100\% \quad (2)$$

整体收缩率计算公式为:

$$S = \frac{\rho_0 - \rho}{\rho_0} \times 100\% \quad (3)$$

式(1)~式(3)中: $L_{x0}$ 和 $L_x$ 分别为分子体系在冷却收缩前后的轴向长度, nm; $L_{y0}$ 和 $L_y$ 分别为分子体系在冷却收缩前后的径向长度, nm; $\rho_0$ 和 $\rho$ 分别为分子体系在冷却收缩前后的体系密度,  $\text{g}/\text{cm}^3$ 。

## 2 结果与讨论

### 2.1 注塑成型过程中材料的热响应

为研究注塑成型过程中 PEEK 材料的热响应特性,重点分析了其在加热熔融、流动填充、增压保压和降温冷却等关键阶段的模型尺寸和密度演变规律。图6为 PEEK 分子体系在各阶段参数及密度随温度的变化。从图6可以看出,在阶段I, PEEK 从 300 K 加热至熔体温度 673 K。此过程由于分子热运动加剧导致体积增大,  $L_x$  和  $L_y$  均随着温度升高而增加, 密度下降。在阶段II, 熔体处于流动状态, 图7为 PEEK 分子体系在拉伸过程中的演化历程。从图7可以看出, 随着模拟时间的增加, 分子链均逐渐伸长, 在流动方向趋近平行排布。拉伸过程中由于允许体系在径向方向自由运动, 导致沿流动方向  $L_x$  逐渐增加,  $L_y$  逐渐减小, 而密度保持相对稳定。

在阶段III, 压力从  $1 \times 1.01325 \times 10^5$  Pa 升至  $1.480 \times 1.01325 \times 10^5$  Pa, 体系在初期发生了轻微收缩。这是由于撤除了外加固定应变速率载荷后分子链的弹性回缩所致。

随着压力持续升高,  $L_x$  和  $L_y$  保持稳定, 而密度却显著上升, 原因是高压使自由体积被压缩, 分子间相互作用增强。在阶段IV, 压力保持为  $1.480 \times 1.01325 \times 10^5$  Pa, 温度从 673 K 降低至模具温度 473 K, 此过程  $L_x$ 、 $L_y$  和密度的变化情况与阶段III类似, 这归因于温度降低减少了分子热运动, 压力维持抑制了体积膨胀, 分子链构象重排趋于稳定。在阶段V, 由于压力突然释放, 分子链的弹性回复导致分子体系的密度先出现了小幅下降, 随后因为温度从 473 K 降至 300 K, 分子链运动能力下降引起体积减小, 从而密度逐渐增加。

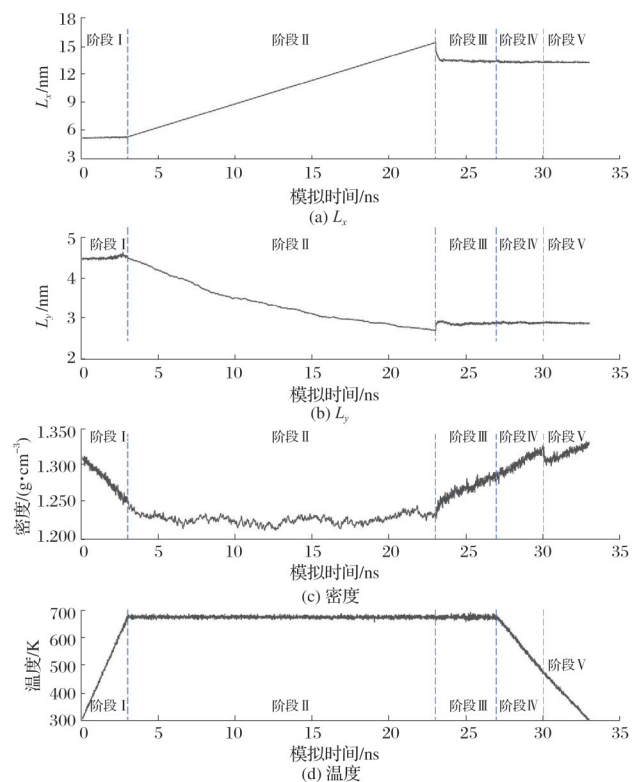


图6 PEEK 分子体系在各阶段参数及密度随温度的变化

Fig.6 Variation of parameters and density of PEEK molecular systems at different stages with temperature

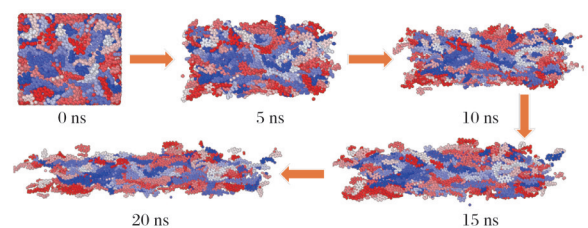


图7 PEEK 分子体系在拉伸过程中的演化历程

Fig.7 Evolution history of PEEK molecular systems during stretching process

### 2.2 PTFE 含量对 PEEK 冷却收缩特性的影响

图8为 PTFE/PEEK 的收缩率及摩擦系数。其中, 摩擦系数由文献[22]得出。从图8a可以看出, 收缩率均表现出一致的趋势, 即径向收缩率大于轴向收缩率。这表明 PEEK 在垂直于流动方向的冷却收缩程度要大于平行于流

动方向。主要原因是流动方向上分子链取向排布整齐,冷却收缩受限,收缩率较小;而垂直于流动方向上,分子链随机分布且取向较弱,在降温时重新排列并产生较大收缩,呈现相对较大的收缩率。聚合物分子链在模腔内冷却时保持了流动状态的取向,由于径向、轴向存在收缩性能的差异,导致注塑件容易产生翘曲变形,尤其是薄壁结构件。

从图8b可以看出,随着PTFE含量的增加,体系的收缩率逐渐增加。原因是PTFE的冷却收缩特性受温度的影响较大,PTFE含量更多的体系表现出更明显的收缩,而体系的摩擦系数随PTFE含量增加呈明显下降趋势,表明材料耐磨性得以提高。

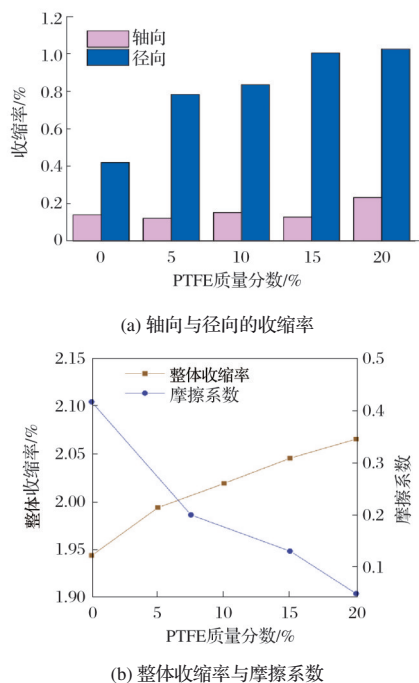


图8 PTFE/PEEK的收缩率及摩擦系数  
Fig.8 Shrinkage and friction coefficient of PTFE/PEEK

综合分析不同含量PTFE改性PEEK体系的冷却收缩特性和耐磨性能。从冷却收缩特性来看,相比添加20%PTFE的PTFE/PEEK复合材料,添加10%PTFE的PTFE/PEEK复合材料收缩率下降2.21%。然而,从耐磨性能方面来说,添加10%PTFE的PTFE/PEEK复合材料摩擦系数约为添加20%PTFE的PTFE/PEEK复合材料的3倍。因此,从材料设计的角度考虑,通过添加PTFE对PEEK材料进行改性时,应优先关注PTFE含量对耐磨性能的改善作用。

### 2.3 石墨含量对PTFE/PEEK冷却收缩特性的影响

通过MD模拟进一步计算在添加不同含量石墨条件下的PTFE/PEEK轴向和径向冷却收缩率。图9为石墨/PTFE/PEEK的收缩率及摩擦系数。其中,摩擦系数由文献[23]得出。从图9a可以看出,不同石墨含量的石墨/PTFE/PEEK复合材料体系的径向收缩率均大于轴向的收缩率,与图8a的结果类似。从图9b可以看出,随着石墨含量的

增加,收缩率逐渐减小。

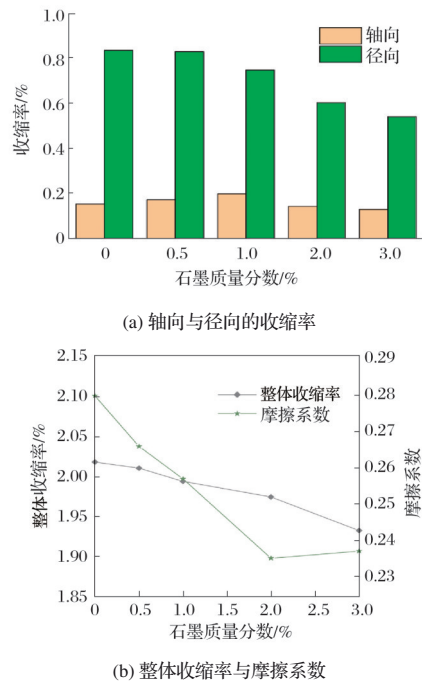


图9 石墨/PTFE/PEEK的收缩率及摩擦系数  
Fig.9 Shrinkage and friction coefficient of graphite/PTFE/PEEK

图10为无石墨烯片与有3%石墨烯片分子体系内空隙的表面阴影对比。从图10可以看出,空隙表面积为63.437 nm<sup>2</sup>的无石墨烯片分子体系,大于空隙表面积为61.176 nm<sup>2</sup>的3%石墨烯片分子体系。因此,添加石墨减少了PTFE/PEEK的分子链运动空间,从而限制其运动能力,导致收缩率减小。从图9b还可以看出,PTFE/PEEK复合材料的摩擦系数随着石墨含量的增加先降低后增加,较小值出现在石墨质量分数为2.0%时,材料的耐磨性显著提高。需要注意,由于摩擦系数测量方法不同,图8b与图9b的摩擦系数在数值上存在一定差异,但这种差异不影响不同组分材料之间的对比分析。

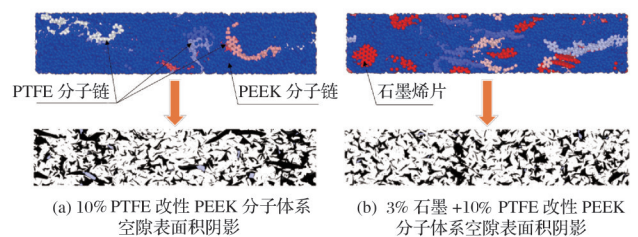


图10 无石墨烯片与有3%石墨烯片分子体系内空隙的表面阴影对比

Fig.10 Comparison of internal void surface area shadow between the system without graphene sheets and the system containing 3% graphene sheets

综合分析不同含量的石墨改性PTFE/PEEK复合材料的冷却收缩特性和耐磨性能,与2.0%石墨改性PTFE/PEEK复合材料相比,3.0%石墨改性材料的冷却收缩率降

低2.14%，表明石墨含量的增加有助于抑制冷却收缩现象。而在耐磨性能方面，两种复合材料的摩擦系数相差仅为0.84%，这表明石墨含量在该范围内对冷却收缩特性的影响要大于对耐磨性能的影响。根据具体应用需求，可以进一步平衡冷却收缩特性和耐磨性能之间的关系，以满足不同的工程需求。

结合 PEEK、PTFE/PEEK 以及石墨/PTFE/PEEK 分子体系的轴向、径向收缩率和整体收缩率进行分析，发现这些材料的分子体系的径向收缩率明显大于轴向收缩率，且径向收缩率趋势几乎与整体收缩率一致。这表明垂直于流动方向的冷却收缩特性在很大程度上决定了注塑成型过程中材料的冷却收缩特性。

### 3 结论

本研究基于 MD 模拟提出的注塑成型全过程的分子模拟方案，有效表征了成型过程中 PEEK 材料的微观结构演变行为，揭示了成型过程中 PEEK 结构演化规律与脱模后冷却收缩特性的相关性，并对不同配比的 PTFE/石墨改性 PEEK 复合材料体系的冷却收缩特性进行对比分析，主要结论如下：在流动方向上，PEEK 分子链排布整齐，抑制了轴向收缩；而在径向方向，分子链取向较弱，导致分子体系的径向冷却收缩率明显大于轴向冷却收缩率，表明 PEEK 在流动方向和垂直于流动方向的冷却收缩程度存在差异性。该差异引起注塑件，尤其是薄壁结构件更容易产生翘曲缺陷。随着 PTFE 含量的增加，PTFE/PEEK 复合材料的冷却收缩率逐渐增加。相比 20% PTFE/PEEK 复合材料，10% PTFE/PEEK 复合材料的冷却收缩率下降 2.21%，而摩擦系数提高至 3 倍。因此，通过添加 PTFE 对 PEEK 材料进行改性时，应优先关注 PTFE 含量对耐磨性能的改善作用。由于石墨填充了 PTFE/PEEK 体系的空隙，使分子链的运动空间减少，导致材料的冷却收缩率随着石墨含量的增加逐渐减小。因此，添加石墨不但有利于改善 PTFE/PEEK 注塑件的耐磨性，还有利于保持其尺寸稳定性。该结论为“高耐磨、低收缩”PEEK 改性设计提供了重要指导作用。

### 参考文献

- VERMA S, SHARMA N, KANGO S, et al. Developments of PEEK (polyetheretherketone) as a biomedical material: A focused review[J]. *European Polymer Journal*, 2021, 147: 110295.
- SIDDIQ A, KENNEDY A R. Compression moulding and injection over moulding of porous PEEK components[J]. *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, 2020, 111: 103996.
- 任天翔, 滕晓波, 黄兴, 等. 聚醚醚酮的改性及应用研究进展[J]. *塑料科技*, 2022, 50(9): 123-128.
- 王文文, 刘洁, 赵训茶, 等. 基于 FDM 的 PTFE/PEEK 多孔轴承保持架材料制备与摩擦学性能研究[J]. *塑料科技*, 2024, 52(6): 16-21.
- DHANUMALAYAN E, JOSHI G M. Performance properties and applications of polytetrafluoroethylene (PTFE): A review[J]. *Advanced Composites and Hybrid Materials*, 2018, 1(2): 247-268.
- 曹溪微, 邓方健. 无机粒子填充改性聚醚醚酮复合材料研究进展[J]. *化工科技*, 2024, 32(6): 95-100.
- GUO Z C, HE J J, GAO R X, et al. Molding of polyether ether ketone (PEEK) and its composites: A review[J]. *Journal of Zhejiang University-Science A (Applied Physics & Engineering)*, 2024, 25(10): 788-823.
- 满其祥, 岳晓丽. 双层热定型碳纤维增强衬套的损伤分析及成型工艺优化[J]. *东华大学学报(自然科学版)*, 2025, 51(1): 131-139.
- DE SANTIS F, PANTANI R, SPERANZA V, et al. As-molded shrinkage on industrial polypropylene injection molded parts: Experiments and analysis[J]. *International Journal of Material Forming*, 2008, 1(Suppl 1): 719-722.
- POMERLEAU J, SANSCHAGRIN B. Injection molding shrinkage of PP: Experimental progress[J]. *Polymer Engineering & Science*, 2006, 46(9): 1275-1283.
- POSTAWA P. Skurcz przetwórczy wyprasek a warunki wtryskiwania [J]. *Polimery*, 2005, 50(3): 201-207.
- KOŚCIUSZKO A, ROJEWSKI M, NOWINKA B, et al. Post-molding shrinkage, structure and properties of cellular injection-molded polypropylene[J]. *Materials*, 2022, 15(20): 7079.
- SUMMA J, KURKOWSKI M, JUNGMANN C, et al. High-frequency ultrasonic spectroscopy of structure gradients in injection-molded PEEK using a focusing transducer[J]. *Sensors*, 2023, 23(14): 6370.
- REVILLA-DÍAZ R, SÁNCHEZ-VALDÉS S, LÓPEZ-CAMPOS F, et al. Comparative characterization of PP nano- and microcomposites by in-mold shrinkage measurements and structural characteristics[J]. *Macromolecular Materials and Engineering*, 2007, 292(6): 762-768.
- KOŚCIUSZKO A, MARCINIAK D, SYKUTERA D. Post-processing time dependence of shrinkage and mechanical properties of injection-molded polypropylene[J]. *Materials*, 2021, 14(1): 22.
- LI G X, WANG J J, NIU B, et al. Atomic oxygen-induced surface erosion behavior and mechanical degradation of polyether ether ketone via reactive molecular dynamics simulations[J]. *The Journal of Physical Chemistry B*, 2023, 127(24): 5509-5520.
- KIM K C, JANG S S. Molecular dynamics simulation study on the structural properties of poly(ethylene terephthalate) under uniaxial extension and thermal shrinkage processes[J]. *Current Applied Physics*, 2018, 18(1): 19-26.
- 赵子岳. 碳纤维增强聚芳醚酮/聚醚醚酮热塑性复合材料二次成型工艺研究[D]. 上海: 东华大学, 2023.
- PLIMPTON S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics[J]. *Journal of Computational Physics*, 1995, 117(1): 1-19.
- LI W Z, LI Y B, HUANG M H. Joining and separating behavior of roughness interface in CF/PEEK nanocomposite[J]. *Polymer*, 2024, 311: 127557.
- SHINODA W, SHIGA M, MIKAMI M. Rapid estimation of elastic constants by molecular dynamics simulation under constant stress[J]. *Physical Review B*, 2004, 69(13): 134103.
- BIJWE J, SEN S, GHOSH A. Influence of PTFE content in PEEK-PTFE blends on mechanical properties and tribo-performance in various wear modes[J]. *Wear*, 2005, 258(10): 1536-1542.
- LIU L, YAN F, GAI F Y, et al. Enhanced tribological performance of PEEK/SCF/PTFE hybrid composites by graphene[J]. *RSC Advances*, 2017, 7(53): 33450-33458.