https://doi.org/10.12442/j.issn.1002-185X.20240589

热力场作用下CFRTP/铝合金界面键合行为研究

曲 华[1]，宋坤林[1]，张丽娇[2]，祝弘滨[2]，王振民[3]
（1. 国家高速列车青岛技术创新中心，山东 青岛 266111）
（2. 中车工业研究院有限公司，北京 100170）
（3. 华南理工大学 机械与汽车工程学院，广东 广州 510000）

摘 要：碳纤维增强热塑性复合材料（carbon-fiber-reinforced thermoplastic，CFRTP）和铝合金的复合结构可综合两种材料的优良性能，在需考虑轻量化的轨道交通、航空航天等领域有巨大的应用潜力。焊接技术具有强稳定性、高密封性等优点，在CFRTP和铝合金复合结构制备成型方面具有优势。然而，由于异种材料存在的物理、化学性质差异导致焊接接头存在相容性低、可焊性差等问题，且目前焊接工艺条件对焊接接头的微观连接机制尚不明确。因此，本研究采用分子动力学（molecular dynamics，MD）模拟方法，探讨了不同温度和压强作用下碳纤维增强尼龙66（carbon-fiber-reinforced polyamide 66，CFRPA66）的基体材料PA66分子与铝合金中的Al原子的运动规律和相互作用机制。结果表明，焊接过程中的温度和压强变化对PA66与Al界面处的原子扩散和结合行为有显著影响。反应时间为10 ps时，界面模型相互作用能绝对值在550 K或1.5 MPa下达到最大值。模拟结果为CFRPA66与铝合金焊接工艺参数优化提供了理论依据，并为CFRTP/铝合金复合结构的工业应用奠定了基础。

关键词：铝合金；尼龙66；界面模型；分子动力学；相互作用能
中图法分类号：TG401 **文献标识码：**A **文章编号：**1002-185X（2025）02-0445-08

碳纤维增强热塑性复合材料（carbon-fiber-reinforced thermoplastic，CFRTP）作为一种高性能复合材料，具有极高的强度和刚度[1]，同时具备良好的韧性和耐化学腐蚀性。此外，铝合金因其优异的机械性能和可加工性，已广泛应用于各类工业领域[2]。然而，单一材料往往难以满足复杂环境下的多重需求。CFRTP与铝合金构建的复合结构可以充分利用两种材料的优点，实现结构轻量化，在航空航天、汽车制造、电子设备等领域有巨大的应用前景。

目前，CFRTP与铝合金的连接方式主要为机械连接和胶接[3]。采用螺栓或铆钉的机械连接方式可能导致材料上存在通孔，造成接头应力集中，大大降低了连接接头的力学性能[4]。胶接工艺固化期长，且具有抗冲击、抗疲劳、耐湿热不足等问题，降低了轻量化结构的性能[5]。

与上述两类方法相比，采用焊接技术将CFRTP与铝合金进行连接，其接头具有稳定性高、密封性好等优点。目前，已经用于CFRTP与铝合金连接的焊接技术主要有感应焊[6]、超声波焊[7]、电阻焊[8]、搅拌摩擦焊[9]、激光焊[10]等。在激光焊接过程中，热源通常作用于铝合金，通过热传导使得CFRTP的树脂基体熔化，进而在高温与压强作用下与铝合金紧密贴合并实现连接[10]。因此，在CFRTP与铝合金的激光焊接中，主要研究CFRTP的热塑性树脂基体与铝合金的连接。

为增强复合接头连接性能，研究学者通常在铝合金表面制备不同深度的几何结构以提高连接界面机械互锁程度。在一定深度范围内，CFRTP与铝合金接头的强度随几何结构深度的增加而增大[11]。然而，由于热塑性材料熔化后的流动能力有限，不能充分进入过深的结构并与铝合金表面贴合，从而产生孔隙，导致接头强度降低。Jiao等[12]在A7075铝合金与CFPA6的焊接过程中制备了不同间距的几何结构。然而，过小的间距由于热积累破坏了几何结构表面的织构形貌，过大的间距减小了CFRTP与铝合金接触面积并导致机械锚结构较小。当间距为0.2 mm时，机械互锁效应最为显著，最大强度为37.5 MPa，比未处理节点强度提高260%。类似的，Zhang等[13]研究了A7050铝合金与CFPA6激光热传导焊接。通过在铝合金表面制备微结构增加其与热塑性树脂基体连接面积，接头的抗剪强度最高达39.0 MPa，比未处理接头提高4倍。进一步地，Zhang等[14]在A6061铝合金表面进行了不同时长阳极氧化处理构建纳米多孔结构，然后与CFPA6连接，发现在不同氧化时间处理下，接头强度均有提高，抗剪强度最高达41.8 MPa，较未处理接头提高

收稿日期：2024-09-10
基金项目：国家重点研发计划（2022YFB4300102）
作者简介：曲 华，女，1982年生，博士，高级工程师，国家高速列车青岛技术创新中心，山东 青岛 266111，E-mail：85693825@qq.com

8 倍。此外，铝合金表面形成的纳米多孔结构在铝合金与热塑性材料的界面处形成过渡层，并生成新的化学键“Al-O-PA6”。事实上，铝合金是由原子组成的。原子在三维空间中的规则排列形成了铝合金的晶体结构，使铝合金具有固定的熔点和各向同性的特性[15]。热塑性树脂由大量的小分子单元聚合而成，这些小分子单元通过共价键连接，形成支链和网状分子链。由于原子成键模式不规则，且在相同条件下热塑性树脂的单分子量、成键顺序和空间构型也不同，从而导致热塑性树脂材料的各向异性。由于金属与热塑性树脂的物理化学性能差异大，相容性差，在接头中容易出现孔洞等接头缺陷，对接头性能造成不良影响。事实上，CFRTP 与铝合金激光焊接的热周期是一个相对复杂的非线性过程，且热输入和压强作用下的材料熔化和冷却都影响着接头的成形。碳纤维增强尼龙 66（carbon-fiber-reinforced polyamide 66，CFRPA66）具有良好的耐磨性、柔韧性和抗冲击强度，是一种广泛使用的热塑性复合材料。本研究以 CFRPA66 为例进行 CFRTP 与铝合金激光焊接微观机理研究。分子动力学（molecular dynamics，MD）模拟作为一种重要的计算方法，能够在原子或分子尺度上建模计算，模拟材料的微观结构和反应机制[16]。本研究通过分子动力学模拟，深入研究 CFRTP 与铝合金的分子、原子在不同温度、压强条件下的运动行为、CFRTP 与铝合金异质界面的相互作用机制。研究结果可为焊接工艺参数调控提供科学依据与理论基础。

1　模拟方法

本研究采用 Materials Studio 软件构建 CFRTP 与铝合金异质界面模型。通过 MD 模拟分析不同温度、压强对热塑性树脂与铝合金吸附界面的影响。模拟的基本思路为：忽略掉铝合金第二相与掺杂元素影响，将两个假想的无限宽度的金属铝和尼龙 66（PA66）贴合构成一个界面。在不同的参数下进行动力学模拟，随后对吸附过程中及吸附后 Al 和 PA66 的相关性质进行计算，研究界面处的 Al 原子和 PA66 分子的相互作用情况。Al 晶胞的晶格常数为 0.404 95 nm，将 Al 晶胞进行几何优化以弛豫 Al 晶胞基底。模拟计算采用 Smart 算法，优化精度为 4.184 J·mol^{-1} 能量收敛容差和 20 920 J·mol^{-1}·nm^{-1} 力收敛容差。模型采用通用力场 Universal，晶胞总外电荷为 0，求和算法中静电相互作用采用 Ewald 求和法，结果的误差限定为 4.184 J·mol^{-1}，范德华力采用原子为单位计算。优化后，Al 晶胞的晶格常数为 0.413 064 nm（图 1a）。由于吸附反应层优先在表面反应，因此将完全松弛的铝晶体沿典型晶面(200)进行切割（图 1b）。切割后铝晶胞上构建真空层后，随后再次进行几何优化，优化参数与 Al 晶胞初始优化相同。几何优化后扩展晶胞如图 1c 所示。构建热塑性材料单体如图 2a 所示，随后进行几何优化。

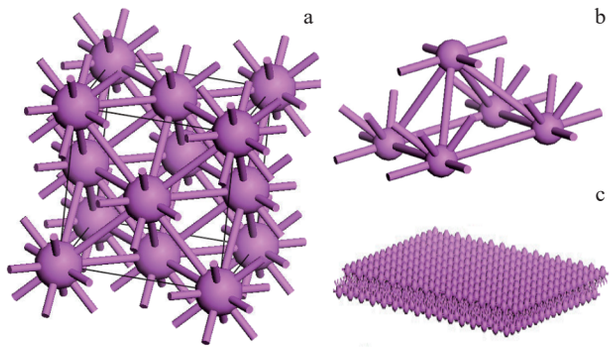


图 1　晶胞模型

Fig.1　Models of Al cell (a), Al (200) plane (b), and substrate of Al cell (c)

模拟计算采用 Smart 算法，优化精度为 4.184 J·mol^{-1} 能量收敛容差和 20 920 J·mol^{-1}·nm^{-1} 力收敛容差。模型采用 COMPASS II（condensed-phase optimized molecular potentials for atomistic simulation studies II）力场，分子总外电荷为 0，求和算法中静电相互作用和范德华力采用原子为单位计算。将 15 个优化弛豫后的 PA66 单体聚合成分子链（图 2b），随后采用无定形晶胞法，采用 COMPASSII 力场并将 10 个长分子链聚合成 PA66 无定形晶胞（图 2c）。建成的 PA66 无定形晶胞的体积由 PA66 的密度决定。

然后，对构建的 PA66 无定形晶胞再次进行几何优化以获得最稳定的模型，优化参数与 PA66 单体优化相同。随后，将热塑性材料 AC 盒子进行 50 次 300 至 500 K 的循环退火，以确保这些模型具有最小的结构能量。退火过程采用通用力场。退火后，得到了稳定的 PA66 无定形晶胞（图 3a）。随后构建 PA66 无定形晶胞和铝基底界面模型，并将其用于后续的动力学模拟。如图 3b 所示，将弛豫后的 PA66 无定形晶胞模型放在 Al (200)晶面上，构建 PA66 与 Al 的界面模型，总体积是 3.9 nm×3.9 nm×11.3 nm，模型中总原子数目为 5963，在垂直于界面的 Z 方向上，分布有 2 层原子的 Al 基底和 PA66 分子链。为了

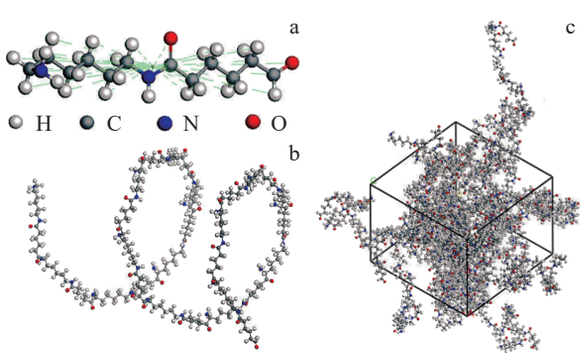


图 2　PA66 基底模型

Fig.2　Models of PA66 substrate: (a) PA66 monomer, (b) PA66 long-chain, and (c) PA66 amorphous cell

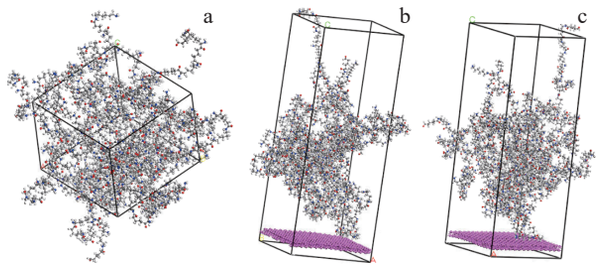


图 3　PA66/Al 初始界面模型

Fig.3　Initial interface model of PA66/Al: (a) PA66 amorphous cell after annealing, (b) initial interface model of PA66 and Al before annealing, and (c) initial interface model of PA66 and Al after annealing

使系统达到热平衡状态以进行接下来的动力学模拟，对这些界面模型进行了 50 次 300 至 700 K 的循环退火，以确保这些模型具有最小的结构能量。退火过程采用通用力场。在激光焊接过程中，需控制界面温度以保证热塑性树脂熔化并流动与铝合金发生界面反应，同时又避免热塑性树脂热分解产生气泡形成焊接缺陷，损害异质接头力学性能。因此，在 MD 模拟中，PA66 采用 300、350、400、450、500、550、600 和 650 K 为不同动力学模拟温度并计算其对界面模型的影响。基于已发表相关文献及实际测量确定焊接过程夹具压强[17–18]，并对界面模型分别设置外部压强为 0、0.5、1.0、1.5、2.0 和 2.5 MPa。为控制压强对界面吸附的影响，不同温度条件下模拟过程中设置统一压强值为 0 MPa。为控制温度对界面吸附的影响，不同压强条件下模拟过程中设置统一温度值为 550 K。模拟在等温等压系综（NPT）下进行，初始速度设置为随机，能量偏差设置为 2.092×10^{12} J·mol^{-1}。模拟总时间设置为 10 ps，时间步长设定为 1 fs。

2　模拟结果与分析

2.1　模型的能量变化

图 4 为 PA66/Al 异质界面模型系统总能量随时间变化情况，由于 PA66/Al 界面模型中原子依据其相互作用力（如范德华力、静电相互作用、化学键等）不断运动、碰撞与重排，这一过程直接导致了体系能量的波动与变化。在模拟的初始阶段，系统可能处于一个非平衡状态，温度、压强不平衡均匀。随着模拟的进行，分子间通过频繁的碰撞交换能量与动量，逐渐趋于热力学平衡[19]。因此，系统总能量发生上下剧烈波动呈正弦波形状，随着时间延长波动幅度逐渐减小，然后趋于稳定。

2.2　模型的密度变化

PA66/Al 界面模型中的原子依据其相互作用不断运动、碰撞与重排，这一过程直接导致了体系密度的波动与变化。事实上，密度较高的区域分子会向低密度区域运动，而低密度区域的分子则受到周围分子的挤压而聚集，形成了一个动态平衡的过程[20]。随着温度的调控、压强的施加，分子间的相互作用强度及运动速率发生变化，进而影响到系统的密度。从图 5a 与图 5b 对比可以发现，在不同温度条件下，界面模型的密度变化相对较小。不同压强下界面模型的密度先迅速增大，然后趋于稳定。说明在加压条件下，PA66/Al 异质界面模型分子运动减缓，相互靠近，系统密度随之上升。

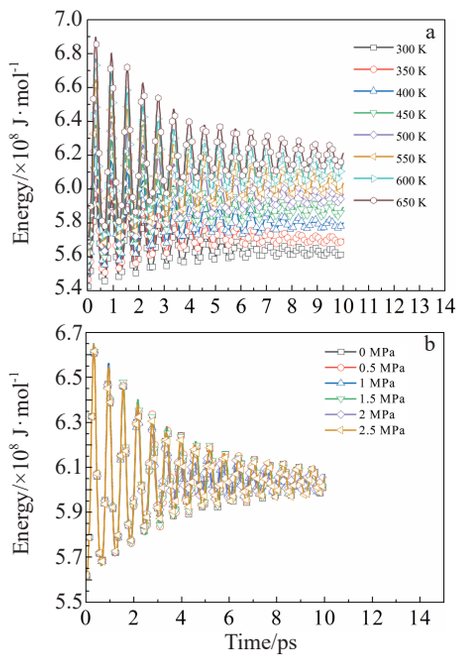


图 4　热力场下 PA66/Al 分子动力学模型能量变化

Fig.4　Energy change of PA66/Al molecular dynamics model under different temperatures (a) and pressures (b)

2.3　模型的运动

PA66/Al 界面模型在不同温度下的计算结果如图 6 所示。可以看出，吸附过程主要是 PA66 向 Al 基体中扩散。这是由以下两个方面导致的：结构方面，PA66 分子链间存在大量空位，这些空位的存在有利于 PA66 分子链的运动。相反，由于 Al 基底中存在大量的金属键，运动所需要的能量很高，不容易发生变形，导致 PA66 分子链很难替换 Al 原子在基体中的位置；密度方面，Al 的原子半径为 0.143 nm，密度较大。热塑性树脂由大量分子链构成，相对致密性较差。因此，密度较小的 PA66 更容易在 Al 基底上运动。

PA66/Al 界面模型在不同压强下的计算结果如图 7 所示。在 0、0.5、1.0、1.5、2.0 和 2.5 MPa 外压下，铝基底的晶格排列依旧很整齐有序。这主要归结于铝基底金属键的特性。可以看出，随着压强的增大，更多的 PA66 分子吸附到铝基底上。

为了分析不同时间界面模型中 PA66 分子和 Al 原子

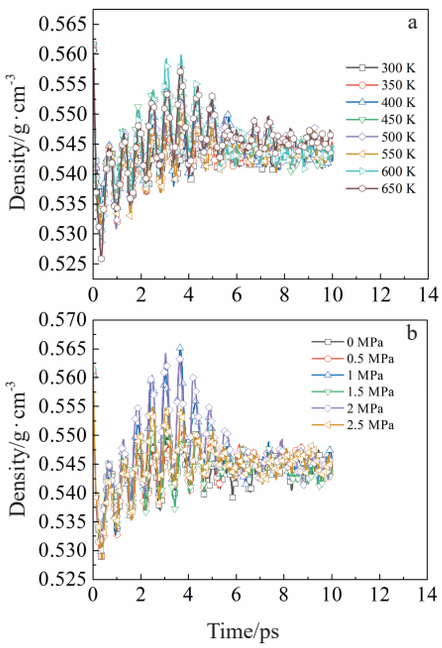


图 5　热力场下 PA66/Al 分子动力学模型密度变化

Fig.5　Density change of PA66/Al molecular dynamics model under different temperatures (a) and pressures (b)

的运动行为，从上述结果中选取热力场下不同时间的模型做进一步分析如图 8 所示。外加温度为 350 K 时，随着模拟的进行，Al 基底的晶格结构相对有序，具有较低的运动能力，直至吸附结束时依旧表现稳定有序状态。相对于 Al 原子，PA66 分子拥有较高的运动能力，然而在温度不足的情况下，PA66 分子链在 Al 基底上运动变化较小。

图 9 为外加压强 0.5 MPa 时不同时间的 PA66/Al 界面模型。随着 PA66 分子运动，系统逐渐达到热力学平衡状态。PA66 分子链在热运动的作用下开始与 Al 表面发生接触，并受到压强的作用而逐渐靠近。压强通过模拟中的边界条件来施加，在压强的作用下，PA66 分子链中的某些部分与铝表面的原子发生相互作用，如范德华力、氢键等。这些相互作用导致 PA66 分子链在铝表面形成稳定的吸附现象。随着吸附时间的增加，更多的 PA66 分子链吸附到 Al 基底上。

2.4　模型的径向分布函数

在分析 PA66 与 Al 异种材料界面模型时，以铝原子为中心、氧原子为“虚拟半径”的径向分布函数（radial distribution function，RDF）可以探讨两种材料在微观尺度上的空间分布关系[21]。图 10 是 PA66/Al 在不同温度、压强下的径向分布函数。$g(r)$-r 图中横坐标是距参考粒子的距离，纵坐标 $g(r)$ 为相距参考粒子 r 处厚 dr 的薄球壳空间内特定粒子的平均密度与整个空间内该粒子的平均密度的比值。氧原子主要存在于 PA66 的分子链中，作为构成其化学结构的一部分。选择距离 PA66 分子链最近的铝基底上的铝原子作为中心。通过概率密度随距离变化情况，可以推测出氧原子与铝原子之间的相互作用强度。较高的吸附强度，有利于形成稳定的吸附结构。在不同的温度条件下，在中心铝原子附近，氧原子出现的概率密度随距离先增大后减小，温度 500 K 时出现了最大

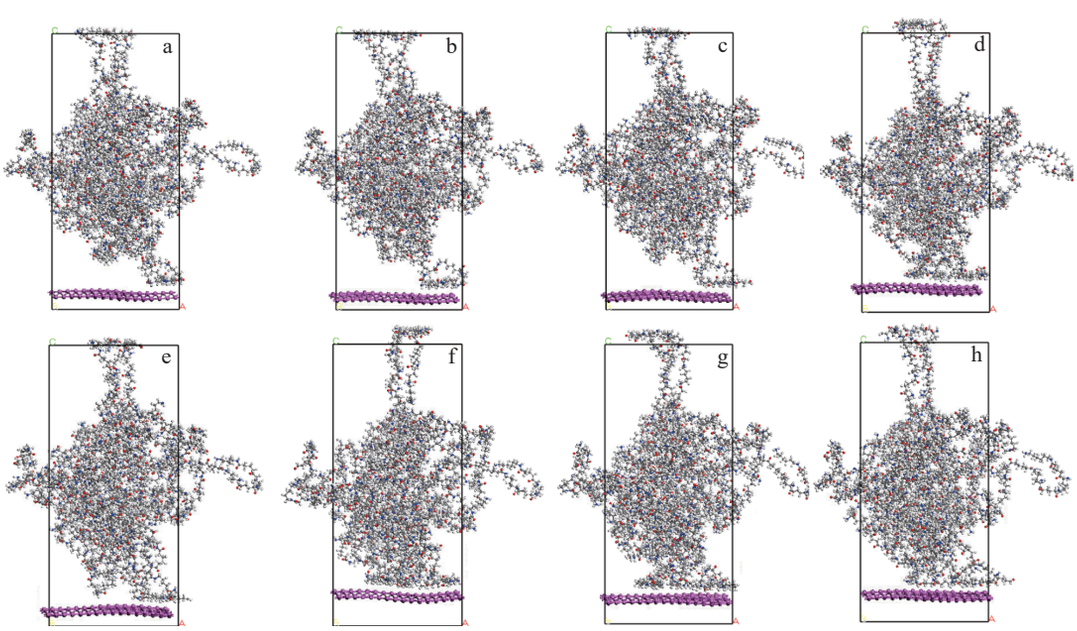


图 6　PA66/Al 在不同温度下的吸附结果

Fig.6　Adsorption results of PA66/Al at different temperatures: (a) 300 K, (b) 350 K, (c) 400 K, (d) 450 K, (e) 500 K, (f) 550 K, (g) 600 K, and (h) 650 K

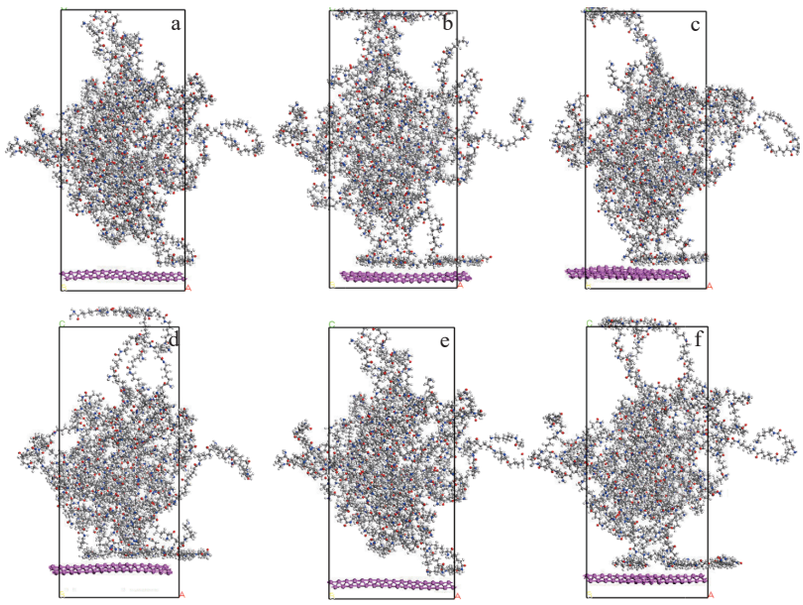


图7　PA66/Al在不同压强条件下的吸附结果

Fig.7　Adsorption results of PA66/Al under different pressure conditions: (a) 0 MPa, (b) 0.5 MPa, (c) 1.0 MPa, (d) 1.5 MPa, (e) 2.0 MPa, and (f) 2.5 MPa

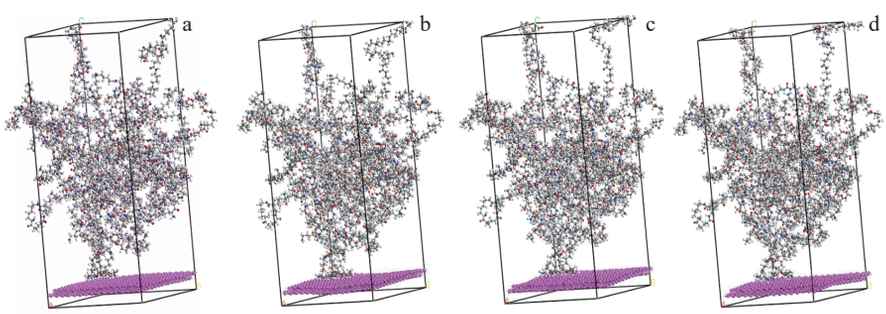


图8　350 K下PA66/Al不同时间下的吸附结果

Fig.8　Adsorption results of PA66/Al at 350 K under different time conditions: (a) 2 ps, (b) 4 ps, (c) 6 ps, and (d) 8 ps

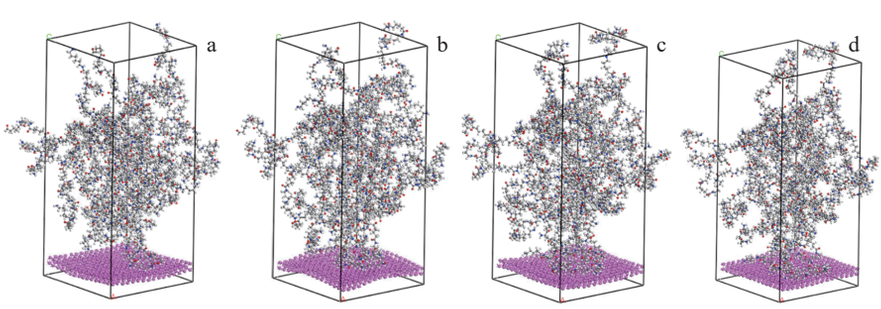


图9　0.5 MPa下PA66/Al不同时间下的吸附结果

Fig.9　Adsorption results of PA66/Al at 0.5 MPa under different time conditions: (a) 2 ps, (b) 4 ps, (c) 6 ps, and (d) 8 ps

的概率密度。同样的，在不同压强条件下，氧原子出现的概率密度也随距离先增大后减小，压强0.5 MPa时出现了最大的概率密度。

2.5　模型的均方位移

均方位移（mean squared displacement，MSD）代表某一时刻体系内原子进行的位移平方的平均值，可用来表

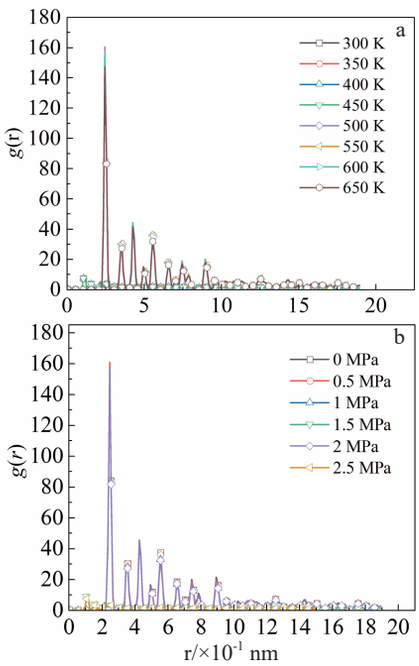


图 10　PA66/Al 界面模型热-力作用下径向分布函数

Fig.10　Radial distribution function of PA66/Al interface model under different temperature (a) and pressure (b)

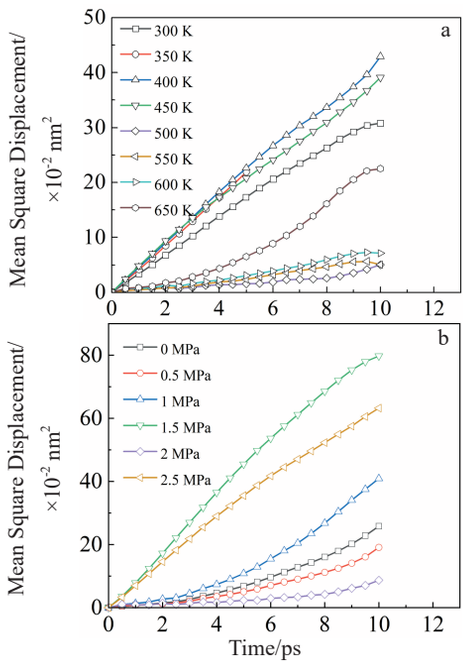


图 11　PA66/Al 界面模型热-力作用下均方位移

Fig.11　Mean squared displacement of PA66/Al interface model under different temperatures (a) and pressures (b)

征体系中分子链的空间位置偏离初始位置的程度，从而说明粒子的运动能力的强弱。图 11a 是 PA66/Al 界面模型在不同温度下的均方位移随时间的变化（在本研究涉及的参数范围内主要体现了 PA66 分子链的均方位移变化）。随着吸附反应的进行，PA66 分子热运动加剧，导致原子间的相对位置发生更频繁的变化。这种热运动直接反映在均方位移上，即随着反应时间的延长，均方位移不断增大[22]。随着温度的上升，分子热运动增强导致原子之间相互作用力变大，400 K 时均方位移增长速度最快。当温度高于 400 K 时，随着温度继续升高，均方位移曲线的增长速度急剧降低后略微升高，10 ps 时 650 K 的均方位移值仍低于 400 K 的情况。这可能是因为，在一定温度下，热运动增强的动能与原子碰撞和分子间相互作用所施加的约束之间达到平衡。首先，在高温下，随着 PA66 分子热运动的增加，体系可能接近于原子位移速率达到饱和点的动态平衡，增加的能量会导致更频繁的原子碰撞，但这些碰撞可能会阻碍进一步的位移，导致原子运动加速度的降低。其次，较高的热能可能会削弱分子间的相互作用，降低驱动分子、原子位置变化的力的有效性。图 11b 是 PA66/Al 界面模型在不同压强下的均方位移随时间的变化。总体上随着反应时间的延长，均方位移不断增大。随着体系压强增大，均方位移曲线的增长速度呈现不规则波动，具体原因有待进一步研究，压强 1.5 MPa 时均方位移增长速度最快。

2.6　模型的相互作用能

计算 PA66/Al 界面模型的相互作用能，确定界面的稳定性，计算公式如（1）所示：

$$E_{ads}=E_{total}-(E_{Al}+E_{PA66}) \tag{1}$$

式中，E_{total} 为界面模型的总能量（J·mol^{-1}），E_{Al} 和 E_{PA66} 分别为 Al 基底和 PA66 模型的计算总能量（J·mol^{-1}）。相互作用能为负值时，表示系统中的粒子之间存在吸引力。在负值的情况下，绝对值大的相互作用能意味着结合后释放的能量更多，结合状态更稳定。图 12 显示了不同温度下 PA66/Al 界面模型相互作用能随时间的变化曲线。首先，在 300 K 温度条件下，PA66/Al 界面模型相互作用能为正值，正的相互作用能通常表明系统需要额外的能量来维持 PA66 分子与金属 Al 表面之间的相互作用，这意味着在该温度下 10 ps 内两种材料之间的结合是弱的或排斥的，PA66 分子的热运动可能不足以促进其与金属 Al

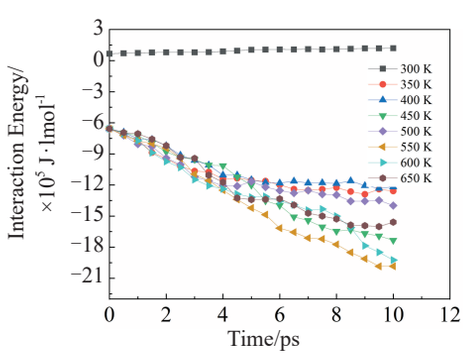


图 12　不同温度下 PA66/Al 界面模型的相互作用能

Fig.12　Interaction energy of PA66/Al interface model at different temperatures

表面的牢固结合或吸附，相对较低的动能阻碍PA66分子和金属Al之间形成稳定的分子间作用力。

在350、400、450、500、550、600和650 K温度条件下，PA66/Al界面模型的相互作用能在不同时间都是负值，表明吸附模型是相对稳定的。随着吸附反应的进行，铝基体和PA66分子链之间的相互作用能绝对值不断增大，表明模型吸附效果增加，系统更加稳定。随着温度的升高，吸附模型内的相互作用能绝对值总体上呈现增大趋势，这可能是由于内能增加使得分子热运动更加剧烈，粒子在不断运动碰撞中吸附间距缩小，PA66/Al界面模型更加趋于稳定状态。在10 ps时，PA66/Al模型的相互作用能绝对值在550 K附近达到最大，之后温度即使增大至600、650 K时，相互作用能绝对值仍然没有超过550 K的情况。这可能归因于模型微观粒子热力学平衡。在高温下，分子间的动能增加，但相互作用能的变化可能被动能的增加所抵消，导致总体的相互作用能绝对值不再增加。

图13为PA66/Al界面模型不同压强下相互作用能随时间的变化曲线，可以发现相互作用能都是负值。体系压强变化对相互作用能影响较大，反应时间10 ps时，压强增大至1.5 MPa相互作用能绝对值最大。事实上，PA66/Al界面模型的分子间既存在引力又存在斥力。当分子间距离很小时，排斥力占主导地位；当分子间距离较大时，引力占主导地位[23]。在某个特定距离（r_0）处，引力和斥力达到平衡，此时分子间的相互作用力为零。当外加一定范围的压强时，分子间距离从大于r_0开始逐渐减小但未达到平衡位置，分子间相互作用的合力仍然表现为引力，分子间相互作用能增大。直至分子间距离为r_0时，分子间相互作用合力为零，分子间相互作用能达到最大。随着压强的增大，分子间距的继续减小，分子间相互作用合力就表现为斥力，不利于分子间相互作用能的提高。此外，在较低压强（0~1.5 MPa）下，吸附质分子首先占据高能量的吸附位点，这些位点具有较强的相互作用力，因此相互作用能增大。随着压强的增加，更多的吸附质分子开始占据这些高能量位点。在1.5 MPa之后，吸附位点逐渐饱和，吸附质分子开始占据低能量位点，导致相互作用能增加程度减小。此外，较高的压强可能会导致吸附质分子之间的排斥力增加，从而降低相互作用能增加程度。

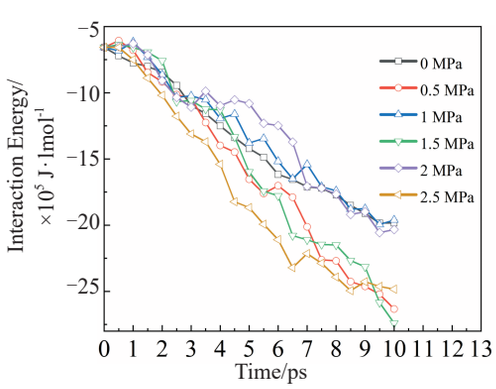


图13　不同压强下PA66/Al界面模型的相互作用能

Fig.13　Interaction energy of PA66/Al interface model at different pressures

3　结　论

1）PA66/Al界面模型在热运动的作用下主要是PA66分子向Al基底上运动。随着运动时间的增加，界面模型均方位移不断增加，界面模型相互作用能不断增大。在不同的温度、压强条件下，在距离中心铝原子附近，氧原子出现的概率密度随距离先增大后减小。

2）温度对PA66/Al界面模型吸附过程存在显著影响。当时间为10 ps时，随着温度从300 K到550 K，相互作用能绝对值整体增大，并在550 K时呈现最大的相互作用能绝对值，表明该温度是PA66/Al界面较好的吸附温度；随着温度进一步上升，相互作用能绝对值下降。

3）压强对PA66/Al界面模型吸附过程存在显著影响。当时间为10 ps时，随着压强的升高，PA66/Al界面模型相互作用能绝对值在1.5 MPa时最大，表明该压强是PA66/Al界面较好的吸附压强。随着压强进一步上升，相互作用能绝对值出现减小及波动。

参考文献　　References

[1] Zhang Dawei, Zhang Qi, Fan Xiaoguang *et al. Rare Metal Materials and Engineering*[J], 2018, 47(12): 3686

[2] Ma Xianglong, Cao Rui, Dong Hao *et al. Rare Metal Materials and Engineering*[J], 2024, 53(4): 1002

[3] Zhang Tingting(张婷婷), Zhu Kaihang(朱凯航), Xu Zhenbo(许振波) *et al. Transactions of the China Welding Institution*(焊接学报)[J], 2023, 44(5): 44

[4] Ding Kunying(丁坤英), Yang Yifei(杨翼飞), Wang Zhe(王者). *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2023, 52(5): 1717

[5] Kreling S, Fischer F, Delmdahl R *et al. Physics Procedia*[J], 2013, 41: 282

[6] Yarlagadda S, Kim H J, Gillespie J W *et al. Journal of Composite Materials*[J], 2002, 36(4): 401

[7] Liu Zeguang, Li Yang, Liu Zhiwei *et al. Journal of Manufacturing Processes*[J], 2023, 85: 702

[8] Troschitz J, Vorderbrüggen J, Kupfer R *et al. Applied Sciences*[J], 2020, 10: 7251

[9] Khodabakhshi F, Haghshenas M, Sahraeinejad S *et al. Materials Characterization*[J], 2014, 98: 73

[10] Katayama S, Kawahito Y. *Scripta Materialia*[J], 2008, 59: 1247

[11] Amend P, Pfindel S, Schmidt M. *Physics Procedia*[J], 2013, 41: 98

[12] Jiao Junke, Jia Shaohui, Xu Zifa *et al. Composites Part B:*

Engineering[J], 2019, 173: 106911

[13] Zhang Z, Shan J, Tan X *et al*. *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*[J], 2017, 90: 3465

[14] Zhang Zhou, Shan Jiguo, Tan Xianghu *et al*. *International Journal of Adhesion and Adhesives*[J], 2016, 70: 142

[15] Zhang Bin(张 斌), Zhang Xiaoyong(张晓泳), Li Chao(李 超) *et al*. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2012, 41(6): 1010

[16] Li Jian(李 健), Yang Yanqing(杨延清), Luo Xian(罗 贤) *et al*. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2013, 42(3): 644

[17] Xu jiejie(徐洁洁), Wang dong(王 栋), Xiao rongshi(肖荣诗) *et al*. *Transactions of the China Welding Institution*(焊接学报)[J], 2021, 42(10): 73

[18] Sheng L Y, Jiao J K, Lai C. *Strength of Materials*[J], 2018, 50(5): 752

[19] Evans D J, Hoover W G. *Annual Review of Fluid Mechanics*[J], 1986, 18(1): 243

[20] Schroeder D V. *American Journal of Physics*[J], 2015, 83(3): 210

[21] Mahmood A, Irfan A, Wang J L. *Polymer Chemistry*[J], 2022, 13(42): 5993

[22] Manz S, Casandruc A, Zhang D *et al*. *Faraday Discussions*[J], 2015, 177: 467

[23] Ye Zhikang(叶治康). *Physics Teacher*(物理教师)[J], 2004, 25(10): 2

Interface Bonding Behavior of CFRTP/Al Alloy Under the Effect of Temperature and Pressure

Qu Hua[1], Song Kunlin[1], Zhang Lijiao[2], Zhu Hongbin [2], Wang Zhenmin[3]

(1. National Innovation Center of High Speed Train (Qingdao), Qingdao 266111, China)

(2. CRRC Academy Co. , Ltd, Beijing 100170, China)

(3. College of Mechanical and Automotive Engineering, South China University of Technology, Guangzhou 510000, China)

Abstract: The composite structure of carbon-fiber-reinforced-thermoplastic (CFRTP) and aluminum alloy can combine the excellent properties of these materials, and has great application potential in rail transit, aerospace and other fields where lightweight needs to be considered. Welding technology has the advantages of strong stability and high sealing, which is a new technology to explore the preparation of CFRTP and aluminum alloy composite structures. However, due to the large differences in physical and chemical properties of dissimilar materials, the welding joint has low compatibility and poor weldability, and the current welding process conditions are not clear about the bonding mechanism of the welded joint. Therefore, the molecular dynamics (MD) simulation method was adopted in this study, and polyamide 66 (PA66) was used as the matrix material of carbon fiber-reinforced PA66 (CFRPA66). The motion and interaction mechanism of PA66 and Al atoms under different temperatures and pressures during welding were studied. The results show that the changes of temperature and pressure during the welding process exert significant effects on the atomic diffusion and bonding behavior at the interface between PA66 and Al. When the reaction time is 10 ps, the absolute value of the interaction energy reaches the maximum value at 550 K or 1.5 MPa. The simulation results provide a theoretical basis for the optimization of welding process parameters between CFRPA66 and Al alloy, and lay a solid foundation for the industrial application of CFRTP/Al alloy composite joints.

Key words: Al alloy; polyamide 66; interface model; molecular dynamics; interaction energy

Corresponding author: Zhang Lijiao, Senior Engineer, CRRC Academy Co., Ltd, Beijing 100170, P. R. China, E-mail: zlj198651@163.com