

使用LAMMPS模拟高分子链被外力拉扯

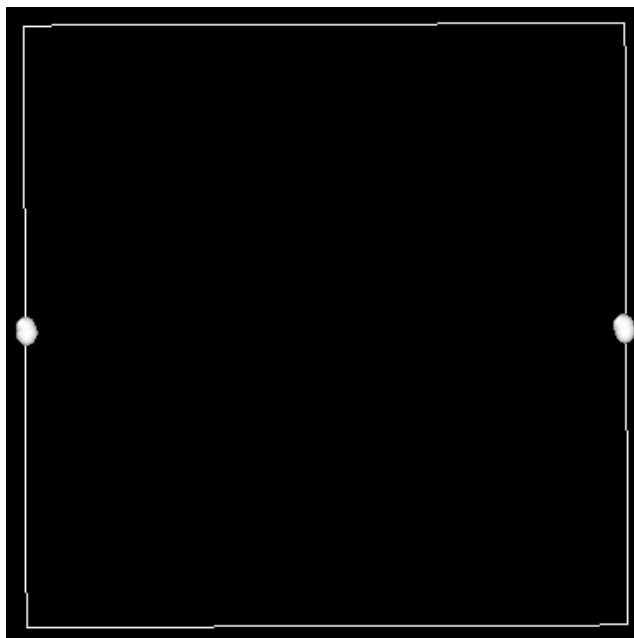
1. 简介

在二维空间生成一个有40个例子,39个键的高分子链。第1个粒子的位置固定，外力施加在第40个粒子上。

外力随时间步长线性增加。统计第一个粒子和最后一个粒子水平距离的变化和回旋半径的变化。

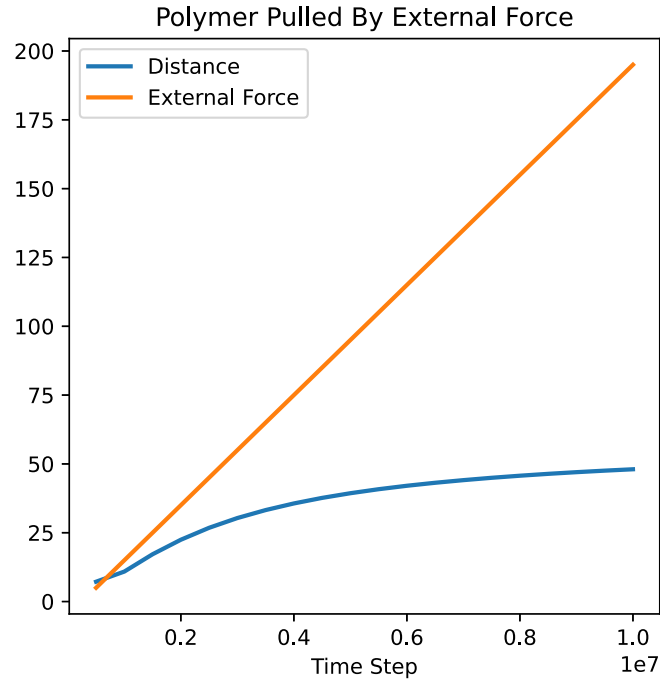
2. 动态演化过程

使用Ovito展示时间演化过程: `process_v3.gif`



3. 统计结果

result.svg



利用公式计算回旋半径

回旋半径:

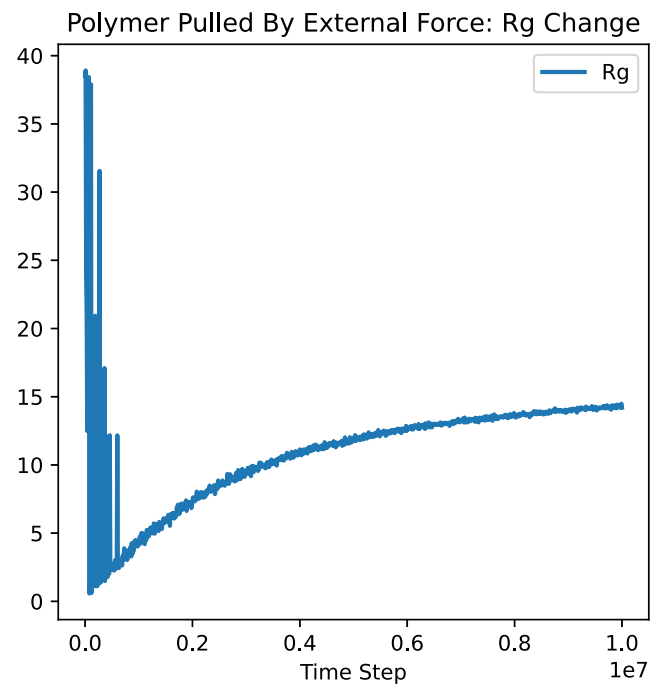
$$R_g^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^n (\vec{r}_i - \vec{r}_c)^2 \quad (1)$$

其中质心坐标:

$$\vec{r}_c = \frac{\sum_{i=0}^n m_i \vec{r}_i}{\sum_{i=0}^n m_i} = \frac{\sum_{i=0}^n \vec{r}_i}{n} \quad (2)$$

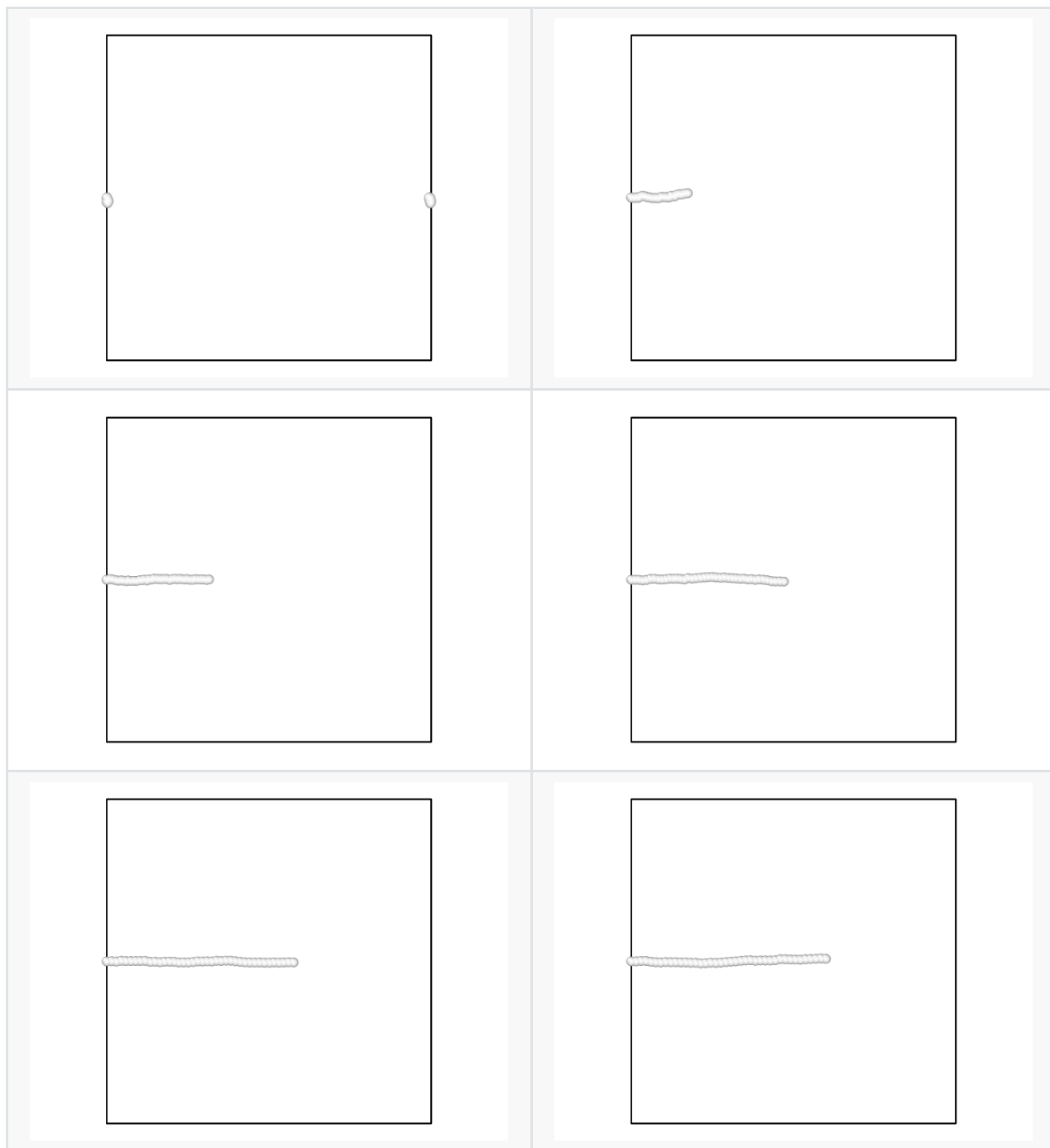
这个例子是二维的,因此:

$$\vec{r}_i = (x_i, y_i) \quad (3)$$



附录:

1. 截图



2. 文件说明:

```
.
├── dist_vs_force (记录距离和力的变化的文件)
├── dist_vs_force_pure
├── dist_vs_force,v
├── lammps.out (输出文件, 记录每个例子的坐标变化)
├── log.lammps
├── PlotData.ipynb(Jupyter Notebook文件)
├── PlotData.py (作统计图的Python程序)
├── poly1.input (例子的初始位置)
├── pull.lam (in文件)
├── pic (图片)
│   ├── 0.png
│   ├── 1000.png
│   ├── 100.png
│   ├── 200.png
│   ├── 400.png
│   ├── 50.png
│   ├── 800.png
│   ├── process_v1.gif
│   ├── process_v2.gif
│   ├── process_v3.gif
│   ├── rg.png
│   ├── rg.svg
│   ├── result.png
│   └── result.svg
├── README.md (结果展示文档)
└── report.pdf
```

参考:[1] <http://www.zqex.dk/index.php/teaching/lammps-demo>