

# 使用LAMMPS模拟高分子链被外力拉扯

---

## 1. 简介

---

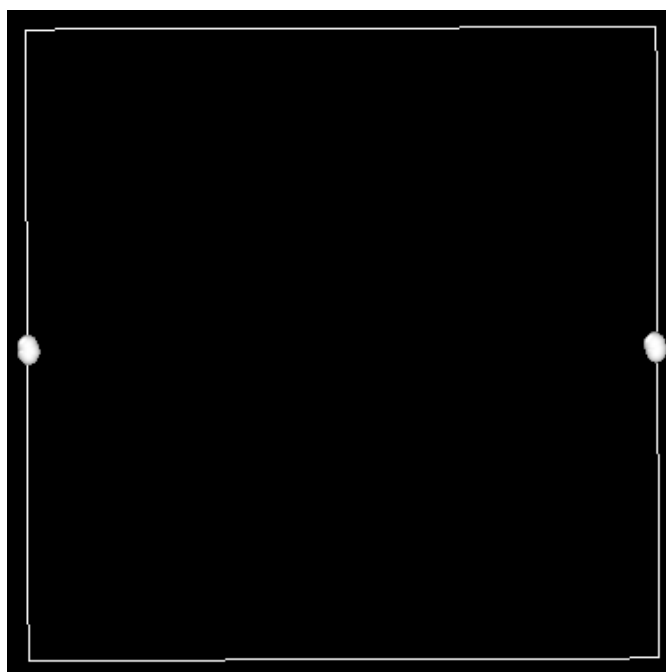
生成一个有40个例子,39个键的高分子链。第1个粒子的位置固定，外力施加在第40个粒子上。

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情况。

## 2. 动态演化过程

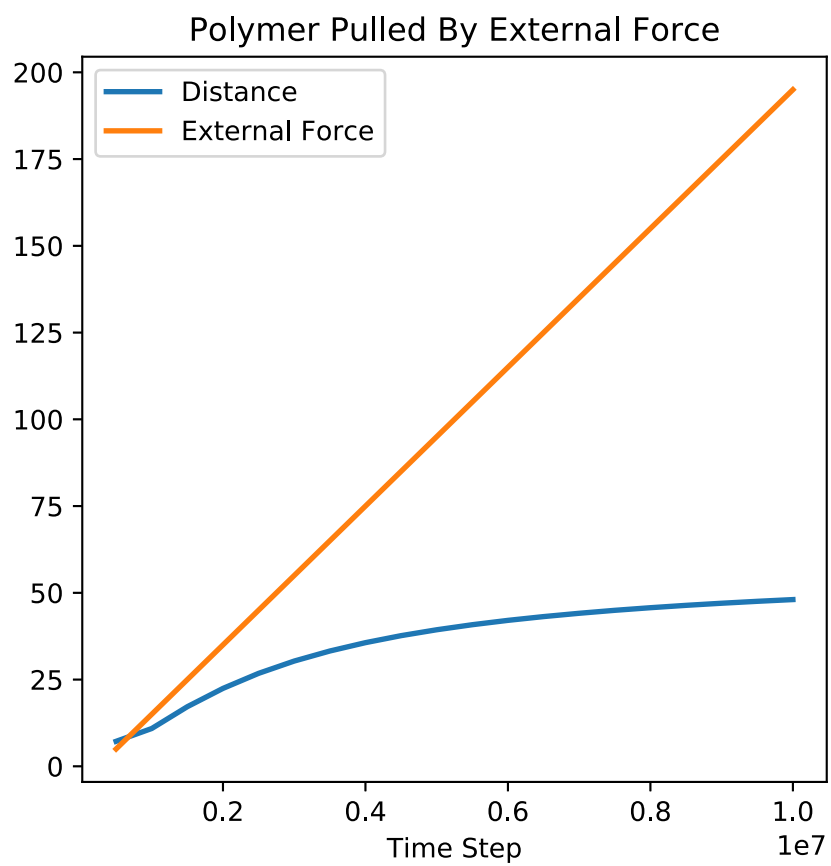
---

使用Ovito展示时间演化过程: `process_v3.gif`



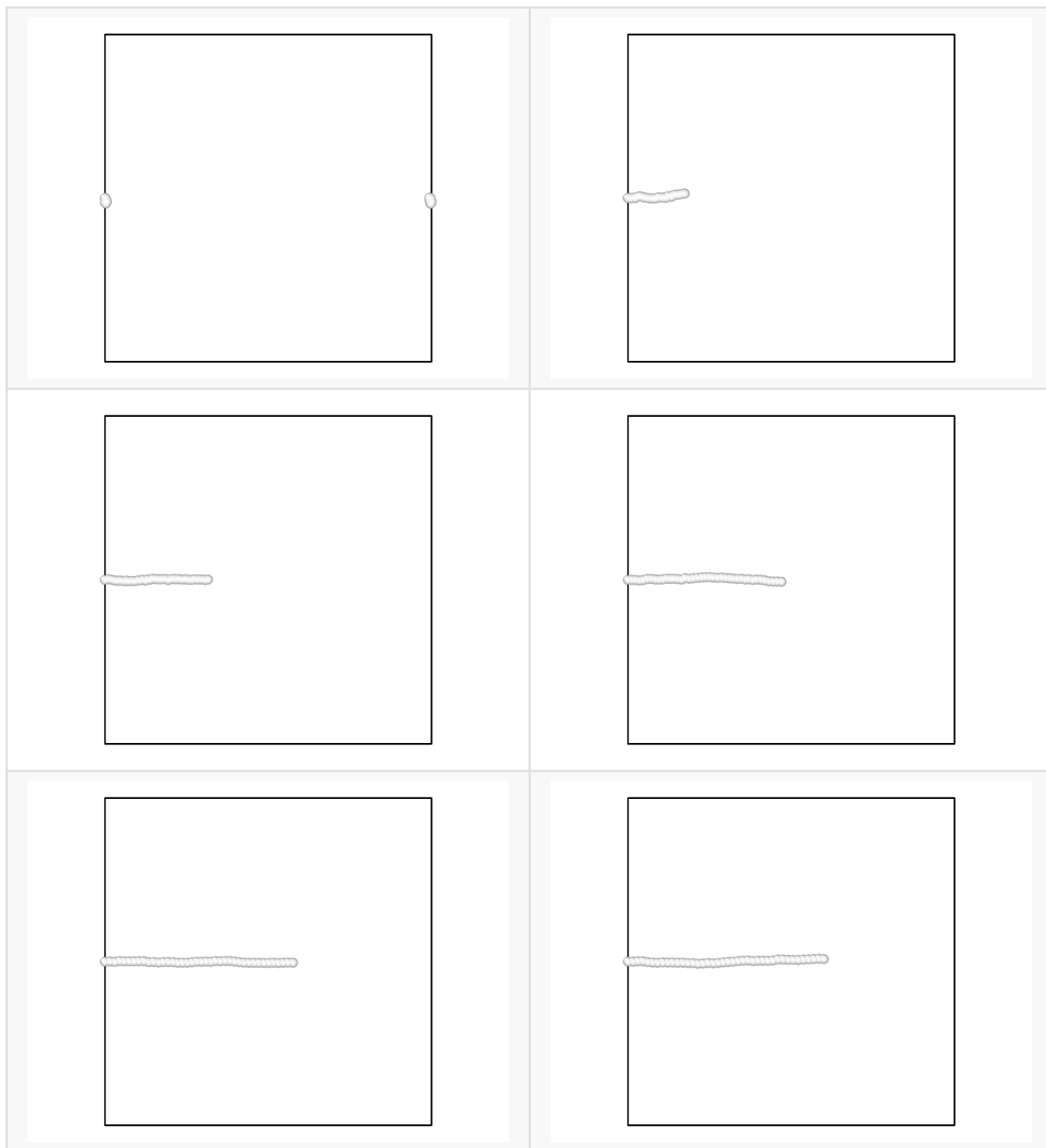
### 3. 统计结果

result.svg



## 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
├─ 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
│   ├─ result.png
│   └─ result.svg
├─ report.md (结果展示文档)
└─ report.pdf
```