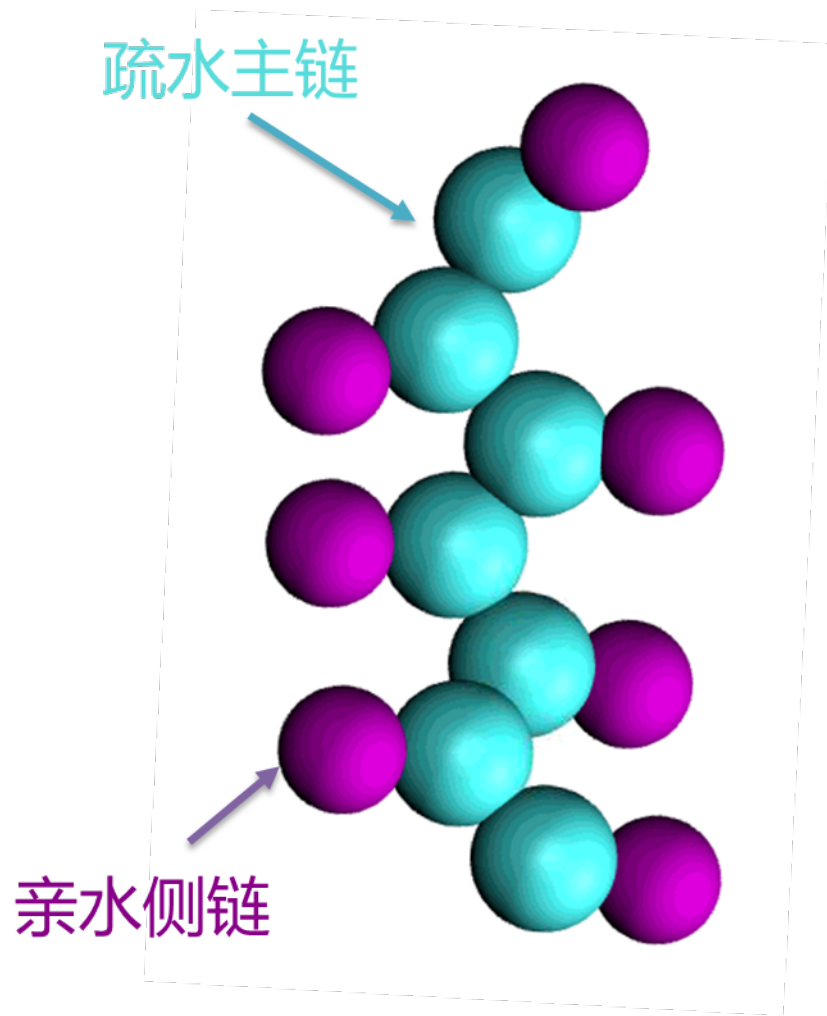




## 带侧链的线形聚合物子组装模拟



### 粗粒化模型构建：

- ✓ 聚合物链：珠簧模型
- ✓ 聚合物链长为7
- ✓ 每个主链粒子上带一个侧链
- ✓ 主链疏水
- ✓ 侧链亲水

### 粗粒化力场：

- ✓ L-J作用势
- ✓ 疏水部分相互吸引
- ✓ 亲水部分弱吸引



## 带侧链的线形聚合物子组装模拟-控制文件

```
# lammps simulation the aggregation of Coarse-Grained Polymer
units          real
atom_style     full
bond_style     harmonic
angle_style    harmonic
dihedral_style charmm
read_data in.data

pair_style     lj/cut 11.0
pair_coeff     1 1      0.10 2.0
pair_coeff     2 2      0.50 3.6

bond_coeff    1      15.0  3.4
bond_coeff    2      15.0  3.7
angle_coeff   1      30.00 114
angle_coeff   2      30.00 132
dihedral_coeff 1      -0.5 1 -180 0.0
dihedral_coeff 2      -1.5 1 -180 0.0

timestep      1.0
dump          1 all   xyz 2000 dump.xyz
#dump         2 all   custom 2000 traj_nvt.lammpstrj id mol type x y z ix iy iz

fix fxlan all langevin 300.0 300.0 1000.0 48279
fix fxnve all nve

thermo_style   custom step temp pe etotal press vol epair ebond eangle edihed
thermo         2000
run            5000000

write_restart  system_after_nvt.rst
```

定义力场中各种作用的类型

L-J定义非成键作用

分子内部的成键作用

温度控制



## 带侧链的线形聚合物子组装模拟-结构文件

### LAMMPS Description

```
672 atoms
624 bonds
816 angles
480 dihedrals
0 impropers

2 atom types
2 bond types
2 angle types
2 dihedral types

0 100.0 xlo xhi
0 100.0 ylo yhi
0 100.0 zlo zhi
```

体系中包含的类型和数目

### Masses

```
1 13.0 # CA
2 50.0 # R
```

粗粒化粒子的质量

### Atoms # full

```
1 1 1 0.0 0.0 1.0 0.0
2 1 2 0.0 0.0 4.4 0.0
3 1 1 0.0 3.2 -1.0 1.22464679915e-16
4 1 2 0.0 3.2 -4.4 5.38844591625e-16
5 1 1 0.0 6.4 1.0 0.0
6 1 2 0.0 6.4 4.4 0.0
7 1 1 0.0 9.6 -1.0 1.22464679915e-16
8 1 2 0.0 9.6 -4.4 5.38844591625e-16
9 1 1 0.0 12.8 1.0 0.0
10 1 2 0.0 12.8 4.4 0.0
11 1 1 0.0 16.0 -1.0 1.22464679915e-16
12 1 2 0.0 16.0 -4.4 5.38844591625e-16
13 1 1 0.0 19.2 1.0 0.0
14 1 2 0.0 19.2 4.4 0.0
15 2 1 0.0 30.0 1.0 0.0
16 2 2 0.0 30.0 4.4 0.0
17 2 1 0.0 33.2 -1.0 1.22464679915e-16
18 2 2 0.0 33.2 -4.4 5.38844591625e-16
19 2 1 0.0 36.4 1.0 0.0
20 2 2 0.0 36.4 4.4 0.0
21 2 1 0.0 39.6 -1.0 1.22464679915e-16
22 2 2 0.0 39.6 -4.4 5.38844591625e-16
23 2 1 0.0 42.8 1.0 0.0
24 2 2 0.0 42.8 4.4 0.0
25 2 1 0.0 46.0 -1.0 1.22464679915e-16
```

粒子的信息：粒子编号、  
所属哪个分子、粒子类型  
以及的空间坐标



## 带侧链的线形聚合物子组装模拟-结构文件

### 分子内部的成键信息

#### Bonds

```
1 1 1 2
2 1 3 4
3 1 5 6
4 1 7 8
5 1 9 10
6 1 11 12
7 1 13 14
8 2 1 3
9 2 3 5
10 2 5 7
11 2 7 9
12 2 9 11
13 2 11 13
14 1 15 16
15 1 17 18
16 1 19 20
17 1 21 22
18 1 23 24
19 1 25 26
20 1 27 28
21 2 15 17
22 2 17 19
23 2 19 21
24 2 21 23
```

#### Angles

```
1 1 1 3 5
2 1 3 5 7
3 1 5 7 9
4 1 7 9 11
5 1 9 11 13
6 1 15 17 19
7 1 17 19 21
8 1 19 21 23
9 1 21 23 25
10 1 23 25 27
11 1 29 31 33
12 1 31 33 35
13 1 33 35 37
14 1 35 37 39
15 1 37 39 41
16 1 43 45 47
17 1 45 47 49
18 1 47 49 51
19 1 49 51 53
20 1 51 53 55
21 1 57 59 61
22 1 59 61 63
23 1 61 63 65
24 1 63 65 67
25 1 65 67 69
```

#### Dihedrals

```
1 1 1 3 5 7
2 1 3 5 7 9
3 1 5 7 9 11
4 1 7 9 11 13
5 1 15 17 19 21
6 1 17 19 21 23
7 1 19 21 23 25
8 1 21 23 25 27
9 1 29 31 33 35
10 1 31 33 35 37
11 1 33 35 37 39
12 1 35 37 39 41
13 1 43 45 47 49
14 1 45 47 49 51
15 1 47 49 51 53
16 1 49 51 53 55
17 1 57 59 61 63
18 1 59 61 63 65
19 1 61 63 65 67
20 1 63 65 67 69
21 1 71 73 75 77
22 1 73 75 77 79
23 1 75 77 79 81
24 1 77 79 81 83
25 1 85 87 89 91
```

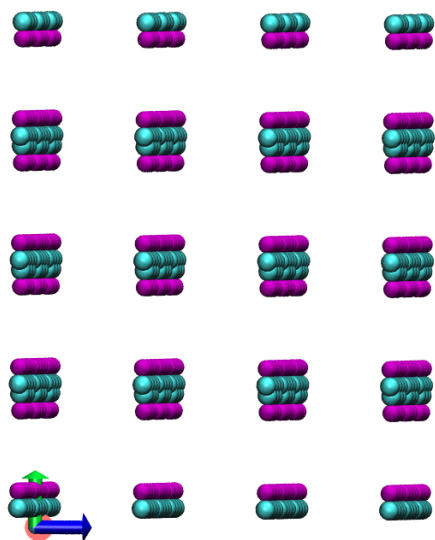
相邻粒子间的连键

键角

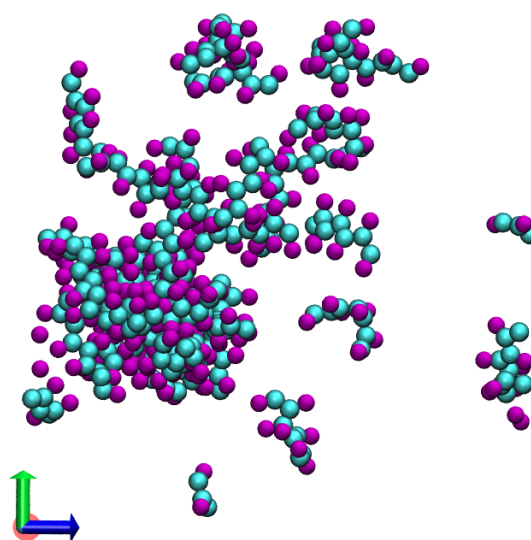
二面角



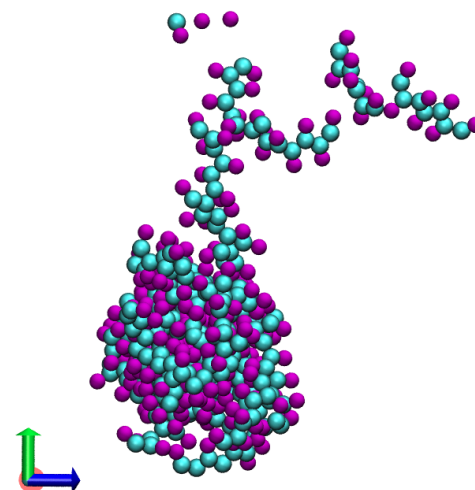
## 带侧链的线形聚合物子组装模拟



初始结构



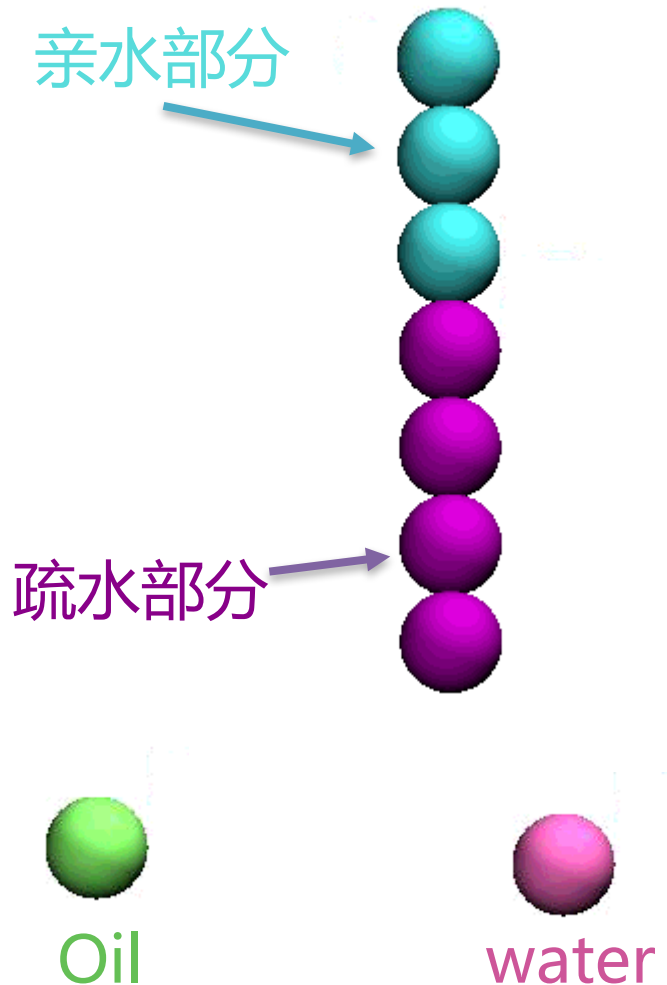
46万步结构



100万步结构



## 双亲分子油水界面的分布



### 粗粒化模型构建：

- ✓ 双亲分子链：珠簧模型
- ✓ 双亲分子链长为7
- ✓ 每个链粒子由亲水部分和疏水部分组成
- ✓ 一个油分子粗粒化成一个粒子
- ✓ 三个水分子为一个粒子

### 粗粒化力场：

- ✓ DPD作用势



## 双亲分子油水界面的分布-控制文件

```

units lj
dimension 3
boundary p p p
atom_style angle
neighbor 0.3 bin
neigh_modify delay 2 every 1
comm_modify vel yes
read_data readdat.dat
mass * 1.0
group polymer type 1 2
group water type 3
group oil type 4
bond_style harmonic
bond_coeff 1 102 1.0
angle_style harmonic
angle_coeff 1 5 180
pair_style dpd 1.0 1.0 61028
pair_coeff * * 25 4.5 1.0
pair_coeff 1 2 30 4.5 1.0
pair_coeff 1 4 35 4.5 1.0
pair_coeff 2 3 35 4.5 1.0
pair_coeff 3 4 50 4.5 1.0
thermo 200
thermo_style custom step temp etotal vol density press ebond bonds
thermo_modify lost ignore lost/bond ignore
timestep 0.01
dump 1 all xyz 200 dump.xyz

fix 1 polymer rigid/nve single
fix 2 polymer setforce 0.0 0.0 0.0
min_style cg
minimize 1.0e-5 1.0e-5 10000 10000

unfix 1
unfix 2

fix 4 all nve
run 100000

```

定义模拟体系中的不同组分

双亲分子内部的成键作用

DPD非成键作用



双亲分子油水界面的分布-结构文件

LAMMPS simulation

48000 atoms  
600 bonds  
400 angles

4 atom types  
1 bond types  
1 angle types

0.000 40.000 xlo xhi  
0.000 20.000 ylo yhi  
0.000 20.000 zlo zhi

体系中包含的类型和数目

模拟盒子大小

Atoms

1	1	1	0.2307379888E+02	0.3772475458E+01	0.1787244918E+02
2	1	1	0.2407379888E+02	0.3772475458E+01	0.1787244918E+02
3	1	1	0.2507379888E+02	0.3772475458E+01	0.1787244918E+02
4	1	2	0.2607379888E+02	0.3772475458E+01	0.1787244918E+02
5	1	2	0.2707379888E+02	0.3772475458E+01	0.1787244918E+02
6	1	2	0.2857379888E+02	0.4638475458E+01	0.1787244918E+02
7	1	2	0.2957379888E+02	0.4638475458E+01	0.1787244918E+02
8	2	1	0.8132605480E+01	0.1025257992E+02	0.6282536000E+01
9	2	1	0.9132605480E+01	0.1025257992E+02	0.6282536000E+01
10	2	1	0.1013260548E+02	0.1025257992E+02	0.6282536000E+01
11	2	2	0.1113260548E+02	0.1025257992E+02	0.6282536000E+01
12	2	2	0.1213260548E+02	0.1025257992E+02	0.6282536000E+01
13	2	2	0.1363260548E+02	0.1111857992E+02	0.6282536000E+01
14	2	2	0.1463260548E+02	0.1111857992E+02	0.6282536000E+01
15	3	1	0.1464177141E+02	0.5742061018E+01	0.9076350715E+01
16	3	1	0.1564177141E+02	0.5742061018E+01	0.9076350715E+01
17	3	1	0.1664177141E+02	0.5742061018E+01	0.9076350715E+01

粒子的信息：粒子编号、所属哪个分子、粒子类型以及的空间坐标





双亲分子油水界面的分布-结构文件

分子内部的成键信息

Bonds				Angles				
				1	1	2	3	4
				2	1	3	4	5
				3	1	4	5	6
				4	1	5	6	7
				5	1	9	10	11
				6	1	10	11	12
				7	1	11	12	13
				8	1	12	13	14
				9	1	16	17	18
				10	1	17	18	19
				11	1	18	19	20
				12	1	19	20	21
				13	1	23	24	25
				14	1	24	25	26
				15	1	25	26	27
				16	1	26	27	28
				17	1	30	31	32
				18	1	31	32	33
				19	1	32	33	34
				20	1	33	34	35
				21	1	37	38	39
				22	1	38	39	40
				23	1	39	40	41
				24	1	40	41	42
				25	1	44	45	46
1	1	1	2					
2	1	2	3					
3	1	3	4					
4	1	4	5					
5	1	5	6					
6	1	6	7					
7	1	8	9					
8	1	9	10					
9	1	10	11					
10	1	11	12					
11	1	12	13					
12	1	13	14					
13	1	15	16					
14	1	16	17					
15	1	17	18					
16	1	18	19					
17	1	19	20					
18	1	20	21					
19	1	22	23					
20	1	23	24					
21	1	24	25					
22	1	25	26					
23	1	26	27					
24	1	27	28					
25	1	29	30					

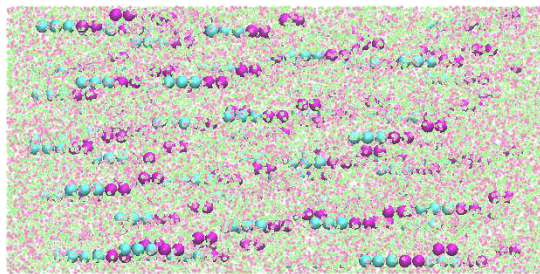
相邻粒子间的连键

双亲分子内部的键角



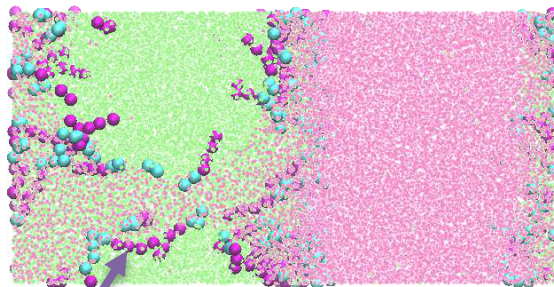
## 双亲分子油水界面的分布

初始结构



油水均匀混合

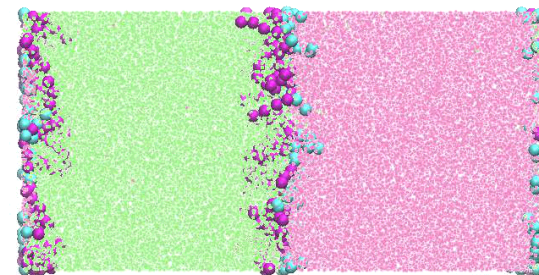
3.84万步结构



逐渐分相

双亲分子构成的水通道

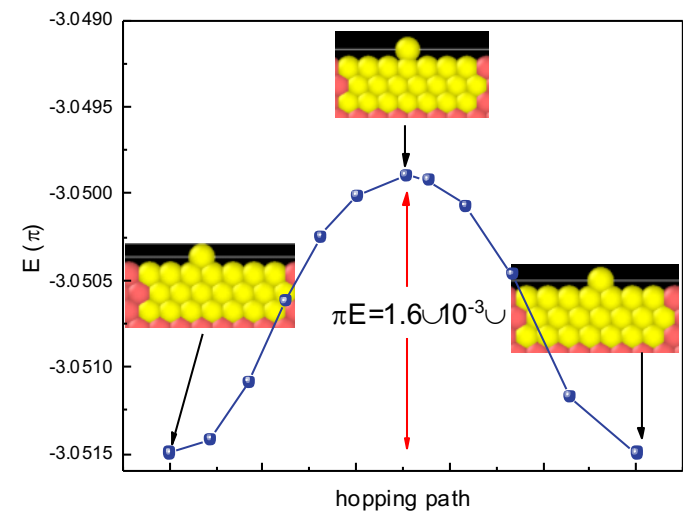
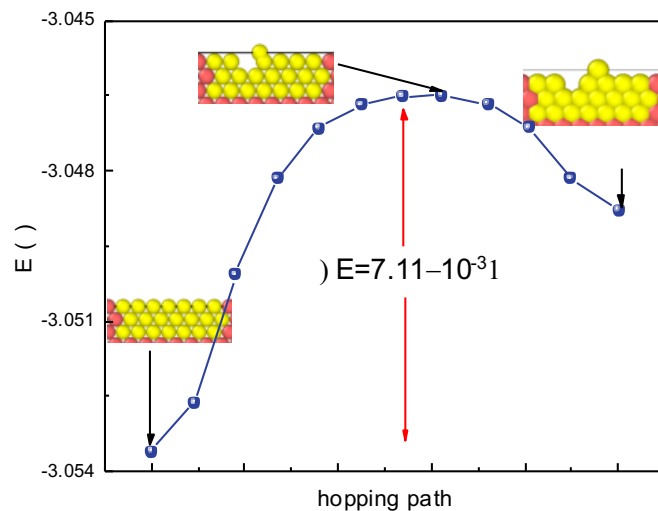
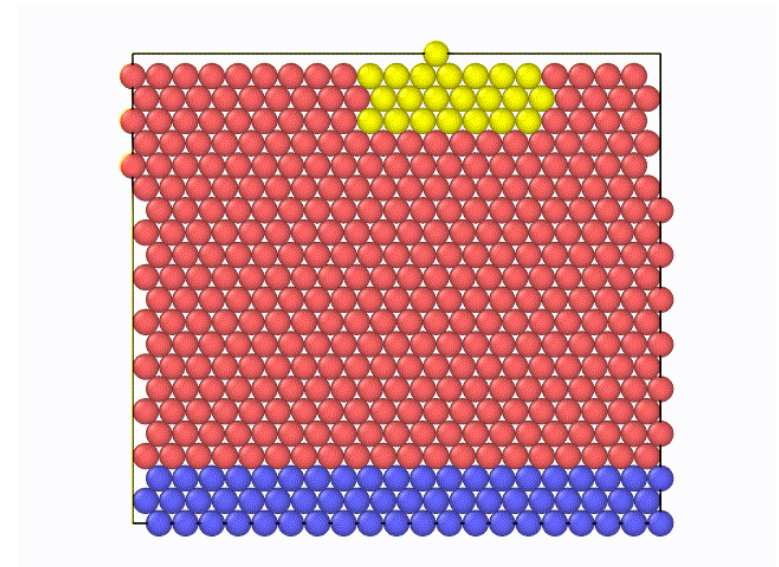
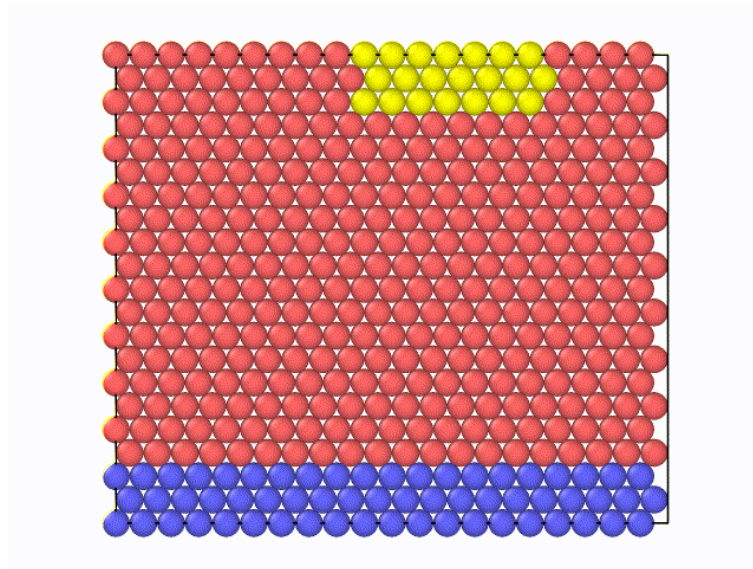
10万步结构



完全分离



## 晶体表面原子的跃迁



层间跃迁的能垒远远高于面内跃迁