

文章编号 1004-924X(2013)06-1537-08

# 不同映射中心的 PMMA 粗粒化分子动力学模型

周明勇<sup>1</sup>, 蒋炳炎<sup>1,2\*</sup>, 鲁立君<sup>1,3</sup>, 张 露<sup>1</sup>

(1. 中南大学 机电工程学院 高性能复杂制造国家重点实验室, 湖南 长沙 410083;

2. 中南大学 航空航天学院, 湖南 长沙 410083; 3. 中南大学 土木工程学院, 湖南 长沙 410083)

**摘要:**建立了基于分子动力学的聚合物粗粒化模型,用于从介观尺度分析聚合物在微纳通道内的流动状态。首先,采用 Materials Studio 软件构建了全同异构的聚甲基丙烯酸甲酯(PMMA)全原子模型,并基于该模型建立了不同映射中心的粗粒化初始模型。对全原子模型进行结构优化和动力学分析,获得了体系的势能统计规律,并采用高斯拟合函数与玻尔兹曼变换方程得到粗粒化力场的初始参数。随后,根据键伸缩势、键弯曲势、非键结势等各项势能的相对强度和相互影响关系,依次迭代并修正力场解析式,获得优化后的粗粒化模型。最后,统计了粗粒化模型中的均方末端距和均方回转半径等静态特性,并与全原子模拟进行对比验证,结果显示二者之间的相对偏差分别为 0.68% 和 6.6%。研究结果表明,映射中心的选取对模型参数有较大影响;优化后的粗粒化模型能很好地吻合全原子模拟下的统计规律,能用于分析和解释纳注射成型中的流动传质问题。

**关键词:**粗粒化力场;分子动力学;聚甲基丙烯酸甲酯;纳注射成型

**中图分类号:**O631.2;O561 **文献标识码:**A **doi:**10.3788/OPE.20132106.1537

## PMMA coarse-grained molecular dynamic models of different mapping centers

ZHOU Ming-yong<sup>1</sup>, JIANG Bing-yan<sup>1,2\*</sup>, LU Li-jun<sup>1,3</sup>, ZHANG Lu<sup>1</sup>

(1. *State Key Laboratory of High Performance Complex Manufacturing, College of Mechanical and Electrical Engineering Central South University, Changsha 410083, China;*

2. *School of Aeronautics and Astronautics, Central South University, Changsha 410083, China;*

3. *School of Civil Engineering, Central South University, Changsha 410083, China)*

*\* Corresponding author, E-mail: jby@csu.edu.cn*

**Abstract:** Coarse-grained (CG) models based on molecular dynamic were developed to analyze the flowing process of polymer melt in nano-sized channels on a mesoscale. Firstly, atomistic models of amorphous isotactic Polymethyl Methacrylate (PMMA) were built by Materials Studio, and initial CG models of different mapping centers were then developed based on the models mentioned above. After the structure optimization and kinetic analysis of the atomistic models, the statistic law of potential energy of the system was obtained and the initial force field forms were calculated by Gaussian fitting function and Boltzmann inversion method. Then, the formula of force field was iterated and modified

收稿日期:2013-01-07;修订日期:2013-02-21.

基金项目:国家自然科学基金重大研究计划培育项目(No. 91123012);国家 973 重点基础研究发展计划资助项目(No. 2012CB025905)

according to the relative strength and the relation of bond, angle and nonbonded potentials and an optimized CG model was obtained successively. Finally, the static properties of the CG model, such as mean square end-to-end distance and mean square radius of gyration, were compared to those of atomistic simulation, and obtained relative deviations are 0.68% and 6.6%, respectively. The results demonstrate that the mapping center has impact on the models and the optimized CG model reproduces the atomistic model well. It can be used to analyze and explain the flow and mass transfer behaviors in the nano-injection molding process.

**Key words:** coarse Grained field; molecular dynamics; Polymethyl Methacrylate(PMMA); nano-injection molding

## 1 引言

在微纳注射成型中,由于实验研究的局限性和理论分析的难度,通常采用数值方法对聚合物熔体的注射、充填过程进行模拟、预测,这对于注射工艺参数的优化、产品质量的提升有着重要的意义<sup>[1-3]</sup>。在高聚物纳结构零件注射成型中,尺度效应急剧增强,聚合物熔体的流动表现出明显的粒子特性和独特的黏弹行为,基于连续介质理论的有限元分析方法难以准确描述高分子链在微纳通道内的流动传质问题<sup>[4]</sup>,因此,粗粒化分子动力学(Coarse Grained Molecular Dynamics,CGMD)方法就成为了最有效的模拟方法<sup>[5-8]</sup>。而粗粒化分子动力学模拟的关键是建立合理的高聚物粗粒化模型,确定适用的力场类型和参数<sup>[9-10]</sup>。

近年来,越来越多的研究者都将目光集中在分子动力学方法在宏观特性的应用上,如聚合物的黏度、流变特性<sup>[11]</sup>和微纳加工技术领域<sup>[12]</sup>。冯洁<sup>[13]</sup>等人采用分子动力学理论,依据不同截面形状对分子链的流动影响规律研究了在宽度为 30 nm 通道内聚乙烯分子的注射过程。但对于复杂体系的动力学仿真,若要实现介观尺度上的流动分析,不仅需要采用更为简化的模型,还需在保证计算效率的前提下,有效地模拟复杂体系下的流动规律。荷兰格罗宁根大学的 Marrink<sup>[14-15]</sup>等人开发了适用于生物大分子模拟的粗粒化力场 Martini,根据分子极性的不同,将力场进行简化分类,极大地提高了计算效率和时空范围。从此,先后有研究者对 PNIPAM 分子<sup>[10]</sup>、聚苯乙烯<sup>[16]</sup>、聚合物膜蛋白<sup>[17]</sup>等构建了粗粒化力场,并通过理论分析和统计静态特性,验证了新模型的有效性。

Carlos<sup>[18]</sup>分析了不同映射比的 PMMA 粗粒化模型对仿真效率和精确性的影响关系,采用平衡态分子动力学方法,研究了 PMMA 薄膜的静态机械性能。

本文针对 PMMA 全同异构体系,以每个单体为一个粗粒子,建立了粗粒化程度更高的聚合物模型,重点研究了不同映射中心位置对模型和力场的影响关系。在该粗粒化模型的基础上,从材料结构特性出发,采用非平衡态分子模拟方法,更为准确、深入地分析了聚合物在微纳通道内的多尺度流动传质等动态特性。

## 2 模型构建和模拟方法

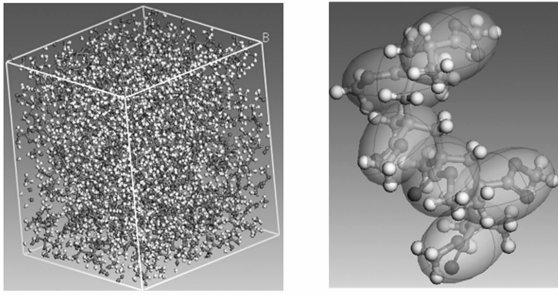
### 2.1 全原子模型

为建立粗粒化模型,首先进行分子动力学的全原子模拟。构建出无定形的 PMMA 全原子模型,内含 20 条聚合度  $M=20$  的全同异构 PMMA 链,体系大小为  $3.8 \text{ nm} \times 3.8 \text{ nm} \times 3.8 \text{ nm}$ 。利用能量最小化方法优化模型,得到更为合理的结构,如图 1(a)所示。

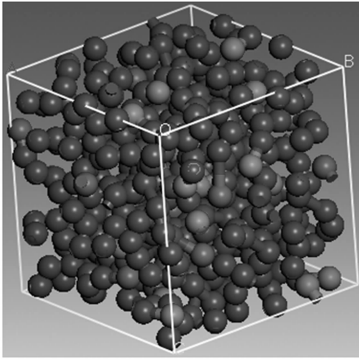
### 2.2 粗粒化模型

以优化后的全原子模型为基础,构建 PMMA 粗粒化模型。以每个 MMA 单体为一个粗粒子,命名为“C”,映射比为 1:7,粗粒子的质量即为每个单体的分子质量,如图 1(b)、1(c)所示。由于 PMMA 高分子链由甲基丙烯酸甲酯(MMA)聚合而成,为高极性聚合物,因此赋予粗粒子为 Martini 力场中极性较高的 P3 或 P4 粒子类型。

为研究映射中心对粗粒化模型及其力场参数的影响,本文建立 2 种不同映射中心的粗粒化模型,其映射中心分别选取在主链上的季碳原子上(模型 I)和单体的质量中心上(模型 II)。



(a) 全原子模型 (b) 粗粒化示意  
(a) Atomistic model (b) Coarse-grained scheme



(c) PMMA 的粗粒化模型

(c) Coarse-grained model of PMMA

图 1 PMMA 体系的粗粒化建模过程

Fig. 1 CG modeling process of PMMA system

## 2.3 模拟方法

高分子间交互作用的分子势能主要包括分子链内的键结拉伸、键角弯曲和扭转作用;分子之间的相互作用则主要体现在范德瓦尔斯作用和氢键作用。体系选择 PCFF (Polymer Consistent Force Field) 力场表征聚合物之间的作用。采用 Harmonic(余弦)谐波函数表征键伸缩势能  $E_{\text{str}}$  和键弯曲势  $E_{\text{bend}}$ , 采用 Lennard-Jones(L-J 12-6) 势能表征分子之间的非键结势能  $U_{\text{vdw}}$ , 数学表达式分别为:

$$E_{\text{str}} = \frac{k_{\text{str}}}{2} (R - R_{\text{str}})^2, \quad (1)$$

$$E_{\text{bend}} = \frac{k_{\text{bend}}}{2} (\cos(\theta) - \cos(\theta_{\text{bend}}))^2, \quad (2)$$

$$U_{\text{vdw}}(r) = 4\epsilon \left( \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right), \quad (3)$$

式中,  $k_{\text{str}}$  为键伸缩常数,  $R_{\text{str}}$  为平衡键长,  $k_{\text{bend}}$  为键角弯曲常数,  $\theta_{\text{bend}}$  为平衡键角,  $\sigma$  为原子间的平衡距离,  $\epsilon$  则为结合能。

在 NVT 系综下(即模拟过程中,系统的粒子数  $N$ , 系统体积  $V$ , 系统温度  $T$  为定值), 对由能量最小化得到的最终结构进行动力学分析。当体系获得最终平稳构象后, 输出势能统计规律, 并对其进行高斯函数拟合, 得到目标原子之间的键长、键角、二面角以及径向分布函数, 随后通过波尔兹曼变换方程得到粗粒化力场解析式。其中高斯拟合函数  $P(l)$  和波尔兹曼变换方程  $V(l)$  分别为:

$$P(l) = \sum_{i=1}^n \frac{A_i}{\omega_i \sqrt{\pi/2}} \exp(-2(l - l_{ci})^2 / \omega_i^2), \quad (4)$$

$$V(l) = -k_B T \ln(P), \quad (5)$$

式中,  $n$  为峰值数目;  $A_i$  为波峰面积;  $\omega_i$  为峰宽;  $l_{ci}$  为峰位;  $T$  为体系温度, 取 350 K;  $k_B$  为波尔兹曼常数, 取为  $1.38 \times 10^{-23}$  J/K;

根据各个势能的相对强度和相互影响关系依次对各项势能进行拟合修正。势能相对强度之间, 键伸缩势最强, 键弯曲势次之, 范德瓦尔斯势则相对较弱:

$$E_{\text{str}} \rightarrow E_{\text{bend}} \rightarrow E_{\text{vdw}}, \quad (6)$$

由此可知, 键长分布规律完全独立于键角度等分布, 不受其他势能的影响, 可首先拟合并优化伸缩势, 其他势能则依此类推。在初始参数的基础上, 采用如下迭代方法依此进行修正和优化。

$$V_{i+1}(r) = V_i(r) + k_B T \ln \frac{P_i(r)}{P_1(r)}. \quad (7)$$

## 3 模拟结果分析

### 3.1 键长分布

为分析映射中心对粗粒化模型及其力场参数的影响, 论文先后研究两种模型所对应的键长分布规律, 通过拟合函数优化势能参数。

#### 3.1.1 模型 I 的键长分布

若映射中心选取在主链的季碳原子上(模型 I), 从全原子模拟的结果可以看出, 键长分布有一个主峰( $n=1$ ), 如图 2 所示。键长分布规律可用单个峰值的高斯函数对其拟合, 随后利用波尔兹曼变换方程, 可得键伸缩势的解析式:

$$V_{\text{str}}(l) = -k_B T \left[ \ln \frac{A_1}{\omega_1 \sqrt{\pi/2}} - \frac{2(l - l_{c1})^2}{\omega_1^2} \right], \quad (8)$$

由于粒子之间的键伸缩力为势能函数对位移的一阶导数, 式(8)中常数项会在体系能量最小化

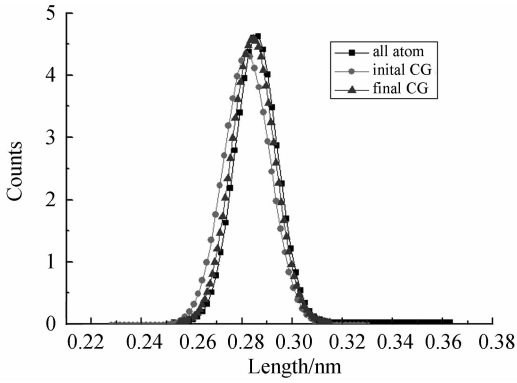


图 2 C-C 键长分布对比(模型 I)

Fig. 2 C-C bond distribution (model I)

和结构优化后趋于零,不会对体系产生影响。式(8)中的二次项即与伸缩势表达式相对应。由此得到全原子键长分布函数和粗粒子键长分布函数。其中粒子间作用力与势能的对应关系为:

$$f = -\frac{\partial V(l)}{\partial l}. \quad (9)$$

“all atom”曲线为全原子模拟得到的分布函数曲线,“initialCG”和“finalCG”曲线分别为初次粗粒化模拟和最终优化后得到的统计规律。由图 2 可知,初次粗粒化模拟条件下的峰高度低于全原子模拟的峰高度,峰宽却要大于全原子模拟宽度。分析表明, $k_0$  越大,伸缩力越强,两原子之间的震荡也会越激烈,从而使得键长分布更为发散,最终使得高度偏低;因此需要适当减小  $k_0$  值,直至 2 条曲线基本吻合。

当  $k_0 = 4.801 \times 10^7 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{nm}^{-2}$  且  $R_0 = 0.287 \text{ nm}$  时,粗粒化模型模拟得到的曲线能与全原子模型的模拟曲线吻合得很好。

### 3.1.2 模型 II 的键长分布

若采取以单体质量中心为粗粒子中心(模型 II),键长分布则呈现出 2 个峰值( $n=2$ ),这表明体系内存在 2 种不同的分子键类型。进行键长分布的高斯拟合和波尔兹曼转换后,得到键伸缩势的表达式。当  $n=2$  时,根据波尔兹曼转换方程,键弯曲势能函数解析式可转化为:

$$V_{\text{bend}}(l) = -k_B T \left[ \ln \frac{A_1}{\omega_1 \sqrt{\pi/2}} - \frac{2(l-l_{c1})^2}{\omega_1^2} \right] + k_B T \ln \left[ 1 + \frac{A_2 \omega_1}{A_1 \omega_2} \exp \left( \frac{2(l-l_{c1})^2}{\omega_1^2} - \frac{2(l-l_{c2})^2}{\omega_2^2} \right) \right]. \quad (10)$$

分析表明,当 PMMA 链中每 2 个 P4 粒子之

间存在 3 个连续的 P3 粒子时,所构建的 Martini 新力场能准确描述高斯峰的位置、面积和峰高等特征参数。由此可知,体系中存在两种平衡位置和键伸缩势强度都不相同的分子键:P3-P3 键与 P3-P4 键。通过迭代算法修正势能参数,得到与全原子模拟基本吻合的分布曲线,如图 3 所示。

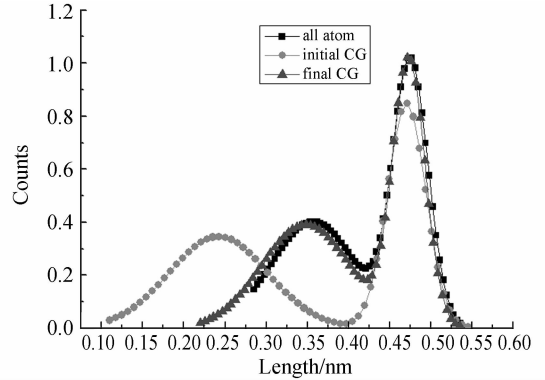


图 3 C-C 键长分布对比(模型 II)

Fig. 3 C-C-C angle distribution (model II)

修正前、后的键伸缩势能参数如表 1 所示。通过数值计算可知,P3-P3 的初始平衡位置为  $0.357 \text{ nm}$ ,将该值带入粗粒化模型中进行模拟,得到的键长平衡位置却为  $0.242 \text{ nm}$ ,发生了一定的偏差。产生偏差的原因可能是数值仿真的模型过于理想,而实际模型为椭球体,其几何中心并未与质量中心重合,因此粒子之间存在空间结构差异,且由于模拟体系不够庞大,仅为纳米尺度,无法精确描述每一个物理统计量。通过适当调整势能参数,最终使得计算得到的拟合结果能基本与模拟结果保持一致。

表 1 键伸缩势参数对比

Tab. 1 Parameters of stretching energy

势能类型	$k_{\text{str}}/\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{nm}^{-2}$		$R_{\text{str}}/\text{nm}$	
	$k_0$	$k_f$	$R_0$	$R_f$
P3-P3	$1.4 \times 10^6$	$1.99 \times 10^6$	0.242	0.395
P3-P4	$8.08 \times 10^6$	$1.10 \times 10^7$	0.470	0.475

### 3.2 键角分布

3 个连续粗粒子的键角分布规律与高斯峰函数相近,因此采取类似拟合键长分布的方法研究 2 种粗粒化模型所对应的键角分布规律,最终确定了键弯曲势能参数。

### 3.2.1 模型 I 的键角分布

如果映射中心在主链的季碳原子上(模型 I),在全原子模拟下,键角分布呈现出 2 个高斯峰,这表明体系内存在两种不同的键弯曲势能类型。为准确拟合高斯峰的特征参数,设定 PMMA 首末两端和链节中段的一个粗粒子为 P4 粒子,其余则皆为 P3 粒子。由于键长分布独立于键角等其他分布,键伸缩势能参数不受键弯曲势能的影响。所以,此前优化的键伸缩势能参数保持不变。

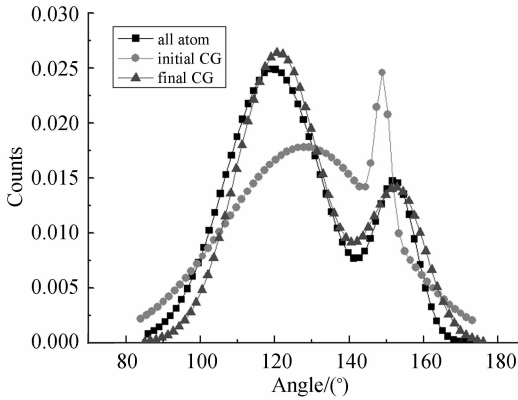


图 4 C-C-C 键角分布对比(模型 I)

Fig. 4 C-C-C angle distribution (model I)

表 2 键弯曲势参数对比

Tab. 2 Parameters of bending energy

势能类型	$k_{\text{bend}} / \text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$		$\theta_{\text{bend}} / (^\circ)$	
	$k_0$	$k_f$	$\theta_0$	$\theta_f$
P3-P3-P3/ P3-P4-P3	$7.45 \times 10^4$	$1.15 \times 10^5$	128.1	119.5
P4-P3-P3	$4.01 \times 10^5$	$4.43 \times 10^5$	149.0	152.6

图 4 为键角分布对比以及优化后的统计规律,经过数次迭代后,2 条曲线能基本保持吻合。键弯曲势参数如表 2 所示。

### 3.2.2 模型 II 的键长分布

映射中心如果在单体质量中心,得到的高斯分布如图 5 所示。全原子模拟下,键角在  $\theta_0 = 94.31^\circ$  左右波动,且波动幅度较大。

将初始参数带入粗粒化力场进行模拟并统计键角分布规律,拟合得到的高斯分布中有小部分键角分布出现异常,其平衡键角约为  $3.76^\circ$ 。位于键角两端的 2 个粗粒子几乎是在同一几何位置,分子键接近重合。数次迭代后,都无法消除这

一异常规律。当 2 个粗粒子无限接近时,粒子之间表现出强大的排斥作用,将迫使二者相互远离直至力平衡。因此,在分子体系里几乎不存在粒子或分子键重合的可能。

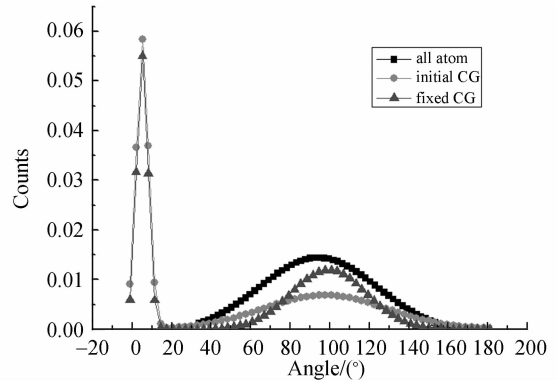


图 5 C-C-C 键角分布对比(模型 II)

Fig. 5 C-C-C angle distribution (model II)

通过两种映射方式的对比发现,映射中心的变换会导致粗粒化力场发生明显变化,但都与全原子模拟大体吻合;若映射中心选取在主链的季碳原子位置,其键长、键角势能分布规律更易拟合,其对称性也更为合理。

### 3.3 非键结势能

由键长、键角分布对比可知,模型 I 更适合描述 PMMA 粗粒化体系。因此,在计算非键结作用时,选取模型 I 进行深入分析。

由于体系中原子的径向分布函数(RDF)主要由 L-J 势的势能强度决定,论文采取统计粒子之间的径向分布规律来确定体系中的非键结势。

在 Martini 粗粒化力场中,P3、P4 粒子之间的 L-J 作用势均为 I 型,其势能参数均为定值,即  $\epsilon_0 = 4.98 \times 10^3 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}$ ,  $\sigma_0 = 0.53 \text{ nm}$ 。但对于

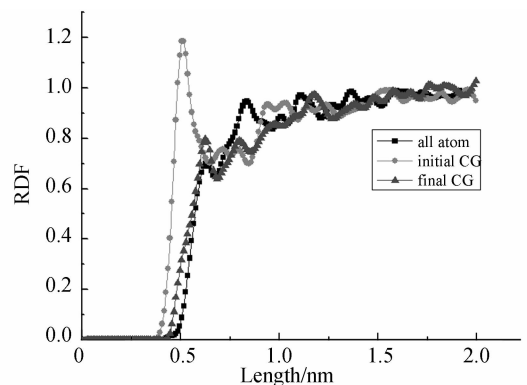


图 6 PMMA 体系的径向分布函数

Fig. 6 Radial distribution functions (RDFs) of PMMA

复杂高分子链体系,需采用迭代算法获取精确的势能参数。经过 3 次迭代计算,2 条分布曲线呈现出类似的变化趋势,如图 6 所示。此时  $\epsilon_f = 2.51 \times 10^3 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}$ ,  $\sigma_f = 0.64 \text{ nm}$ 。当分子间距离  $\sigma$  在 0.63 nm 和 0.76 nm 附近时,径向分布曲线出现了小幅度的波峰;而当  $\sigma$  超过 1.50 nm 后,分布函数逐渐收敛,并最终趋近于 1。

### 3.4 模型对比与检验

由于每一个 MMA 单体在粗粒化模型中被视为一个粗粒子,故建立的粗粒化模型粒子数目只有全原子模型的 1/15 左右;且由于体系中键扭转势、静电作用等强度相对较弱,故只考虑粒子间的键结势、键弯曲势和范德瓦尔斯作用。因此,该粗粒化模型建立方法将大大简化模型体系,其计算效率将明显优于全原子模型,如表 3 所示。与其他粗粒化模型相比,其计算效率也有所提高。

表 3 全原子模型和粗粒化模型下的计算效率对比

Tab. 3 Comparison of atomistic and Coarse-grained models

模拟体系	全原子模型	粗粒化模型
粒子数目/个	6 040	400
运算步数/步	5 000	300 000
并行处理数/个	12	2
运算时间/s	1 538	587

表 4 全原子模拟和粗粒化模拟下的 PMMA 均方末端距和均方回转半径对比

Tab. 4 Mean-square end-to-end distance and mean-square radius of gyration for atomistic and Coarse-grained simulation of PMMA

模拟体系	$\overline{h^2}/(\text{nm})^2$	$\overline{S^2}/(\text{nm})^2$	$\overline{h^2}/\overline{S^2}$
全原子模型	6.226	0.991	6.283
粗粒化模型	6.268	0.936	6.697

均方末端距  $\overline{h^2}$  和均方回转半径  $\overline{S^2}$  这 2 个典型静态特性物理量可用于描述 PMMA 高分子链体系的空间构象。通过比较全原子模拟下的均方末

端距和均方回转半径,来验证粗粒化力场的有效性。对比结果如表 4 所示。

由表 3 可知,二者之间的相对偏差分别为 0.68% 和 6.6%。对于自由结合链或自由旋转链(即高斯链),当分子量趋于无穷大时,其均方末端距与均方旋转半径比值为 6。这表明,此高分子链体系可在一定程度上简化为高斯链。

通过对 PMMA 静态性质的分析发现,构建的粗粒化力场能够较好地实现分子动力学模拟。在忽略体系中的二面角扭转势和氢键等作用的情况下,采用粗粒化力场模拟得到的结果依然能很好地符合全原子模拟的统计规律,这表明新力场在保证模拟准确性的同时,能大大简化模拟体系、缩短计算时间,是可行可信的。

## 4 结 论

论文采用分子动力学方法,较为系统地研究了 2 种映射中心下的 PMMA 粗粒化模型,通过对比全原子分子动力学下的统计规律,修正了体系内分子链之间的键长、键角及非键结作用力参数,并进行了静态特性的验证,得到了行之有效的粗粒化模型。研究表明:与全原子模型相比,粗粒化模型能保证仿真的计算精度,且能大幅度提高计算效率,二者之间的静态偏差不超过 7%。映射中心对 PMMA 粗粒化模型及其力场参数有着重要影响。由于模型的空间结构的不对称性,体系存在多种粒子类型,需要设定不同的力场形式。映射中心如选取在分子主链上的季碳原子上,将更易实现拟合,模拟结果也更为合理。

论文下一步将利用构建的粗粒化模型,分析 PMMA 熔体在粗糙壁面内的流动状态,通过分子运动理论,更为深入地了解聚合物在微纳通道内的传质过程。

*Processing*, 2010, 25(1): 63.

- [2] CHOI S J, KIM S K. Multi-scale filling simulation of micro-injection molding process [J]. *Journal of Mechanical Science and Technology*, 2011, 25(1): 117-124.

### 参考文献:

- [1] TOFTEBERG T R, ANDREASSEN E. Multiscale simulation of injection molding of parts with low aspect ratio microfeatures [J]. *International Polymer*

- [3] XIE L, ZIEGMANN G, JIANG B Y. Numerical simulation method for weld line development in micro injection molding process [J]. *Journal of Central South University of Technology*, 2009,16(5): 774-780.
- [4] WANG C, XU J J, CHEN H Y, *et al.*. Mass transport in nanofluidic devices[J]. *Science China Chemistry*, 2012;1-16.
- [5] 郭洪霞. 高分子粗粒化分子动力学模拟进展[J]. 高分子通报, 2011,(10):154-163.  
GUO H X. Progress on Coarse-Grained molecular dynamics simulation of polymers [J]. *Polymer Bulletin*, 2011,(10):154-163. (in Chinese)
- [6] FARHADIAN N, SHARIATY N M, MALEK K, *et al.*. Coarse-Grained molecular dynamics simulation of lysozyme protein crystals [J]. *Chemical Product and Process Modeling*, 2011,6(1):1-21.
- [7] 陈景飞, 郝京诚. 表面活性剂溶液行为的粗粒化模拟[J]. 化学进展, 2012,24(10):1890-1896.  
CHEN J F, HAO J CH. Coarse-Grained molecular dynamics simulation of surfactants in aqueous solution [J]. *Progress in Chemistry*, 2012, 24(10): 1890-1896. (in Chinese)
- [8] 钟天平. 基于 Martini 力场架构的响应性聚合物刷的粗粒化分子模拟[D]. 广州:华南理工大学, 2012.  
ZHONG T P. *Responsiveness of polymer brushes: coarse-grained molecular dynamic studies based on martini force field framework* [D]. Guangzhou: South China University of Technology, 2012. (in Chinese)
- [9] MILANO G, PLATHE M. Mapping atomistic simulations to mesoscopic models: A systematic coarse-graining procedure for vinyl polymer chains [J]. *The Journal of Physical Chemistry B*, 2005,109(39):18609-18619.
- [10] WANG Z L, HE X J. Developing Coarse-Grained force fields for PNIPAM single chain from the atomistic model [C]. *The 3rd International Conference on Bioinformatics and Biomedical Engineering, Beijing, P. R. China, ICBBE*, 2009: 1-4.
- [11] PADDING J T, BRIELS W J. Systematic coarse-graining of the dynamics of entangled polymer melts: the road from chemistry to rheology [J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2011,23(23):233101.
- [12] 黄跃飞, 李洪平. 基于 AFM 的单晶铜薄膜压痕的分子动力学研究[J]. 光学精密工程, 2008,16(11):2072-2075.  
HUANG Y F, LI H P. Molecular dynamics study of AFM-based nanoindentation of monocrystalline copper film [J]. *Opt. Precision Eng.*, 2008,16(11):2072-2075. (in Chinese)
- [13] KISARAGI Y. Molecular dynamics simulation of injection of polyethylene fluid in a variable cross-section nano-channel [J]. *Chinese Science Bulletin*, 2011,56(17):1848-1856..
- [14] MARRINK S J, RISSELADA H J, YEFIMOV S, *et al.*. The MARTINI force field: coarse grained model for biomolecular simulations [J]. *The Journal of Physical Chemistry B*, 2007, 111(27): 7812-7824.
- [15] RZEPIELA A J, LOUHIVUORI M, PETER C, *et al.*. Hybrid simulations: combining atomistic and coarse-grained force fields using virtual sites [J]. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2011,13(22):10437-10448.
- [16] RAO SH L, LI X J, LIANG H J. Developing coarse-grained force fields for polystyrene with different chain lengths from atomistic simulation [J]. *Macromolecular Research*, 2007,15(7):610-616.
- [17] PERLMUTTER J D, DRASLER W J, XIE W, *et al.*. All-atom and coarse-grained molecular dynamics simulations of a membrane protein stabilizing polymer [J]. *Langmuir*, 2011, 27(17): 10523-10537.
- [18] HERNANDEZ S. *Molecular dynamic simulation of thermo-mechanical properties of ultra-thin poly (methyl methacrylate) films* [D]. Texas A&M University, 2010.

## 作者简介:



**周明勇**(1989—),男,湖南郴州人,博士研究生,2011年于中南大学获得学士学位,主要从事聚合物微纳注射成型方面的研究。E-mail: zmy0714@yahoo.cn



**鲁立君**(1976—),男,湖南桃源人,讲师,1997年、1999年、2006年于华中科技大学分别获得学士、硕士和博士学位,主要从事微纳流体数值模拟等方面的研究。E-mail: rod.k.lu@gmail.com



**蒋炳炎**(1963—),男,浙江浦江人,教授,博士生导师,1983年于东北大学获得学士学位,1990年于中南工业大学(现中南大学)获得硕士学位,2004年于中南大学获得博士学位,现为中南大学航空航天大学常务副院长,主要从事微注射成型、聚合物加工、精密成型技术、复合材料成型等方面的研究。E-mail: jby@csu.edu.cn



**张露**(1990—),男,安徽淮北人,硕士研究生,2012年于中南大学获得学士学位,主要从事微纳注射成型方面的研究, E-mail: 309147043@qq.com

(版权所有 未经许可 不得转载)