

哑铃式聚合物分子模型流变性质的Brown动力学模拟

方建农, 范西俊

浙江大学力学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 采用非平衡态Brown动力学方法(NEBD)模拟FENE哑铃分子模型在定常拉伸流动和突然开始拉伸流动中的运动, 计算流变性质, 考虑位形相关Stokes阻力系数等模型参数的影响, 并从非线性随机动力学角度, 分析相图, 给出拉伸粘度曲线和哑铃伸展曲线不会出现S型的解释

关键词 [Brown动力学模拟](#) [分子模型](#) [流变学](#) [分子理论](#)

分类号

BROWNIAN DYNAMICS SIMULATION OF FENE DUMBBELL MODELS WITH CONFIGURATION DEPENDENT FRICTION COEFFICIENTS

浙江大学力学系

Abstract

Results of nonequilibrium Brownian dynamics simulations of the steady state and transient rheological behavior of nonlinear elastic dumbbell models in elongational flow is reported. The simulations include examination of the effects of configuration dependent friction coefficients and spring parameter. The nonlinear random dynamical theory is used to analyze phase diagrams and an interpretation of no S shaped curves for the elongational viscosity or for the mean square end to end distance is gi...

Key words [Brownian dynamics simulation](#) [molecular model](#) [rheology](#) [kinetic theory](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(316KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [参考文献](#)

服务与反馈

- ▶ [把本文推荐给朋友](#)
- ▶ [加入我的书架](#)
- ▶ [加入引用管理器](#)
- ▶ [复制索引](#)
- ▶ [Email Alert](#)
- ▶ [文章反馈](#)
- ▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

- ▶ [本刊中 包含“Brown动力学模拟”的相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)

- [方建农](#)
- [范西俊](#)