

·教育与教学·

“材料模拟与计算创新实训”课程案例设计与实践

高洋洋* 赵秀英

(北京化工大学先进弹性体研究中心 北京 100029)

摘要: “材料模拟与计算”课程分为基础理论教学与创新实训教学。在基础理论教学内容方面, 知识点相对理论性强且具有一定的抽象性, 学生完全掌握具有一定困难。而创新实训教学正是通过设计一些重要的高分子材料模拟实践案例, 将抽象复杂的理论知识与实际应用案例结合起来。这里以硅橡胶热导率模拟计算为例, 通过软件工具构建硅橡胶材料原子模型, 采用反向非平衡分子动力学模拟方法施加热流, 建立稳定的温度场, 基于傅里叶方程计算硅橡胶材料的热导率。结果发现学生对模拟知识理解与实践操作更深入, 有效改善了教学效果。

关键词: 材料模拟与计算创新实训; 硅橡胶; 热导率

“Innovation Training to Material Simulation and Computation” Course Case Design and Practice

GAO Yang-yang*, ZHAO Xiu-ying

(Center of Advanced Elastomers Materials, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029)

Abstract: The course of “Material Simulation and Computation” is divided into basic theoretical teaching and innovative training teaching. In terms of basic theoretical teaching content, the knowledge points are relatively theoretical and have a certain degree of abstraction, making it difficult for students to fully grasp them. Innovative training section combines abstract and complex theoretical knowledge with practical application cases by designing important polymer material simulation practice cases. The simulation calculation of thermal conductivity of silicone rubber is taken as an example. A software tool is used to construct an atomic model of silicone rubber material. The reverse non-equilibrium molecular dynamics simulation method is used to analyze heat flow, establish a stable temperature field, and calculate the thermal conductivity of silicone rubber material based on Fourier equation. As a result, it is found that students have a deeper understanding and practical operation of simulated knowledge, effectively improving teaching effectiveness.

Keywords: Innovation training to material simulation and computation; Silicone rubber; Thermal conductivity

引用: 高洋洋, 赵秀英. “材料模拟与计算创新实训”课程案例设计与实践. 高分子通报, 2026, 39(5), 862–866.

Citation: Gao, Y. Y.; Zhao, X. Y. “Innovation training to material simulation and computation” course case design and practice. *Polym. Bull.* (in Chinese), 2026, 39(5), 862–866.

随着计算机技术的迅速发展, 模拟与计算正变得日益成熟, 其在高分子材料研究中扮演着越

来越重要的作用。其中, 分子动力学模拟是一种基于原子/分子尺度的模拟方法, 目前已在高分

2026-01-07 收稿, 2026-01-27 录用, 2026-04-09 网络出版

基金项目: 国家自然科学基金(基金号 52473068)

* 通信联系人: 高洋洋, E-mail: gaoyy@mail.buct.edu.cn

doi: 10.14028/j.cnki.1003-3726.2026.26.010

子材料玻璃化转变温度、力学性能、流变性能、热导性能、导电性能等研究发挥了越来越重要的作用^[1-4]。分子动力学模拟具备结果的高重现性与高精度型,同时计算过程中高分子材料结构与性能关系能以图形的方式清晰在学生面前展现出来,降低了高分子材料复杂结构的抽象思维难度。分子动力学模拟基本原理包括牛顿运动方程、边界条件设置、热浴选择以及热力学性质等方面的计算,知识点相对理论性强且具有一定的抽象性,缺乏直观演示,使得部分抽象思维较弱的学生难以完全认识与掌握分子动力学模拟的基本原理。因此,开展“材料模拟与计算创新实训课”教学十分必要,有助于学生在学习基础理论之后进行实践操作,提高对所学分子动力学模拟知识的理解与应用能力^[5-7]。

这里以硅橡胶材料热导率模拟计算作为创新实训教学设计与实践案例。首先利用模拟软件构建硅橡胶材料的原子模型,通过计算硅橡胶材料原子模型的热导率,从原子/分子尺度了解计算热导率的方法与操作,提高学生的思维分析能力。该创新实训教学案例融合了高分子材料、高分子物理、计算机等多学科知识,通过创新实训教学案例培养学生对分子动力学模拟基础知识、实践操作以及高分子材料多学科知识综合分析应用的能力,还激发了学生对新材料、新技术和新应用的探索兴趣。

1 案例设计

1.1 设计目的

掌握硅橡胶材料原子模型的构建方法,包括硅橡胶原子、重复单元、分子链以及多链模拟盒子的构建以及力场参数设置和结构优化。

了解硅橡胶材料原子模型热力学平衡模拟,包括模拟步长、模拟系综、模拟温度、模拟时间等参数的设置与运行。

掌握硅橡胶材料原子模型热导率的计算方法,包括热导率的模拟方法、模拟原理、模拟数据获取、模拟结果处理。

1.2 设计原理

这里主要采用反向非平衡分子动力学模拟(RNEMD)方法来计算硅橡胶材料的热导率,这是一种非常成熟且高效的计算方法。RNEMD的基本思想是在体系中通过交换热区与冷区原子

的速度来强制产生热流,进而在体系内部建立稳定的温度梯度,并通过傅里叶传热定律来获得热导率^[8]。如图1所示,将模拟体系沿着热流方向均分成 N 层,将中间第 $N/2$ 层指定为热板(hot slab),将第0层指定为冷板(cold slab)。选择冷板中最“热”的原子和热板中最“冷”的原子,然后交换它们的速度。由于板中的速度分布足够宽,因此冷板中最“热”的原子预计会比热板中最“冷”的原子更“热”。该操作在冷板和热板之间引入热通量,最终整个系统达到稳定状态。通过改变交换操作的频率和要交换的原子数,可以调节施加到系统上的热通量。在此过程中,因为模拟盒子只是内部的原子进行速度交换,体系的总能量保持恒定。最终模拟盒子沿换热方向形成稳定的温度梯度。当体系达到热力学稳定之后,计算热流通量和沿着热流方向的温度梯度图。根据傅里叶传热定律,热导率(K_i , $W/(m \cdot K)$)的计算公式^[9]为

$$K_i = \frac{-j_z}{\Delta T / \Delta z} \quad (1)$$

式中,负号代表热流和温度升高的方向相反, j_z 为热流通量, W/m^2 ; $\Delta T / \Delta z$ 为沿着热流方向的温度梯度, K/m 。

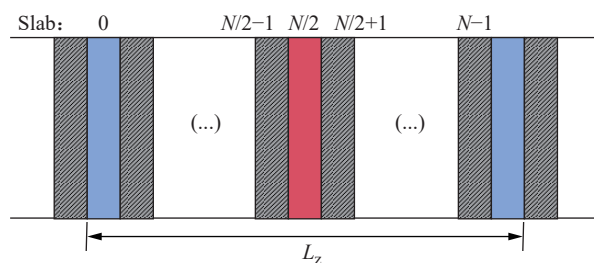


图1 反向非平衡方法的示意图

Figure 1 Schematic diagram of the RNEMD

1.3 设计步骤

硅橡胶材料热导率模拟计算设计案例主要步骤如下所述。

1.3.1 硅橡胶重复单元构建

采用Material Studio(MS)软件Visualizer模块,构建出硅橡胶的单元结构,通过Forcite模块中几何优化功能对结构进行优化。结构优化使用经典的Smart算法,精度和Max. interactions分别设为Medium和5000。使用Compass II力场^[10],范德华作用力采用Atom based方法计算而静电力采用Ewald求和法。随后可以采用MS软件中旋转、平移方式多角度观察硅橡胶分子链结构,如图2所示。

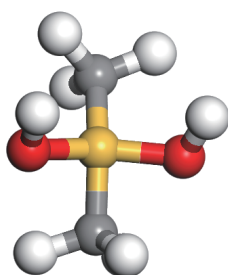


图2 硅橡胶单体结构示意图

Figure 2 Schematic diagram of silicone rubber monomer structures

1.3.2 硅橡胶分子链构建

在MS中对构建单元进行能量优化后,利用Build Polymer工具对优化重复单元明确指定头原子与尾原子。随后在Homopolymer工具中设置硅橡胶分子链的结构参数。这里硅橡胶分子链链长设置为30,采用head-to-tail形式建立重复单元数为30的硅橡胶分子链。随后对构建的分子链进行能量优化,同样使用经典的Smart算法,精度和Max. interactions分别设为Medium和5000。完成优化后,分子链的总能量显著降低,键长、键角参数均接近理论参考值,其分子链结构如图3所示。

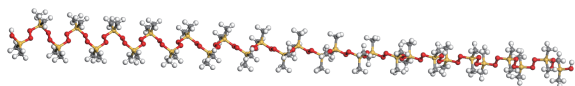


图3 硅橡胶分子链结构示意图

Figure 3 Schematic diagram of silicone rubber chains and boron nitride filler structures

1.3.3 硅橡胶原子模型构建与优化

采用MS软件中的Amorphous cell模块构建硅橡胶材料模型,这里在周期性晶胞中放入经过结构优化后的20条硅橡胶分子链,设置密度为 0.6 g/cm^3 ,从而得到硅橡胶材料模型。随后采用MS的Forcite模块再次进行几何优化,以消除不合理构型和原子重叠。完成几何优化后,最后获得了一个结构合理、能量较低且无显著原子重叠的硅橡胶初始原子模型。此模型满足分子动力学模拟对初始构型的基本要求。

1.3.4 硅橡胶原子模型的动力学平衡

在NPT系综下进行动力学模拟,该系综允许系统的粒子数(N)、压力($P=0.1 \text{ MPa}$)和温度($T=300 \text{ K}$)保持不变,而体积(V)和能量可以波动。采用Nose-Hoover热浴/压浴方法分别对温度和压力进行控

制。采用周期性边界条件,模拟的时间步长设置为 1 fs ,运行总时间为 1 ns ,通过判断温度、密度和能量等判断体系是否达到平衡。硅橡胶材料模型最终的平衡结构如图4所示。

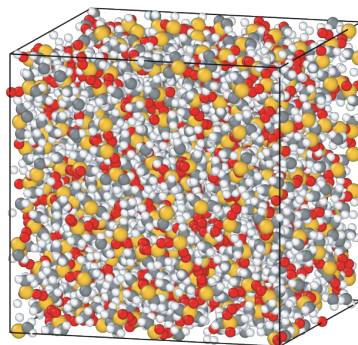


图4 热力学平衡下的硅橡胶结构示意图

Figure 4 Schematic diagram of silicone rubber structure under thermodynamic equilibrium

1.3.5 硅橡胶原子模型热导率计算

采用反向非平衡分子动力学模拟(RNEMD)方法来计算硅橡胶材料的热导率。采用NVE系综下,在热板和冷板区域实现原子速度交换,频率为每 0.1 ps 交换1次,交换时间为 1 ns ,直至温度达到稳定值,形成高温热板和低温冷板。在系统达到稳定之后,继续在NVE系综下运行 100 ps ,通过导出数据进而统计热流通量和温度分布,根据傅里叶方程计算获得硅橡胶原子模型的热导率。

1.4 结果与讨论

1.4.1 热流通量计算

热流通量(j_z)是计算硅橡胶材料热导率的重要参数之一,其计算公式为

$$j_z = \frac{1}{2tA} \sum_{\text{transfer}} \frac{m}{2} (v_{\text{hot}}^2 - v_{\text{cold}}^2) \quad (2)$$

其中, t 为换热时间,s; A 为热量流过的截面积, m^2 ; m 为原子的质量,g; v_{hot} 和 v_{cold} 分别为冷板中的最“热”原子和热板中的最“冷”原子的速度, m/s 。

计算模拟结果如图5所示。可以看出,热流通量在模拟时间范围内基本达到稳定,表明体系到达了稳定状态,计算得到平均热流通量为 $j_z=7.90 \times 10^9 \text{ W/m}^2$ 。

1.4.2 温度分布计算

温度分布是计算硅橡胶材料热导率的另一重要参数。温度与原子的速度和质量紧密相关。计算沿着热流方向的温度分布如图6所示。

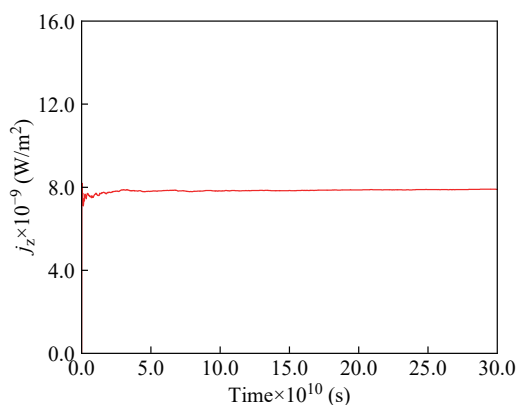


图5 模拟热流通量随着模拟时间变化关系

Figure 5 Heat flux as a function of the simulation time

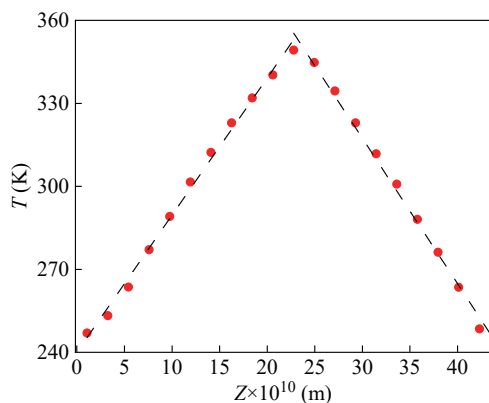


图6 沿着热流方向温度分布

Figure 6 Temperature distribution along the heat flux direction

可以看出,在冷板和热板位置温度存在波动,而在中间区域呈现很好的线性关系,计算获得 $\Delta T/\Delta Z = 5.22 \times 10^{10} \text{ K/m}$ 。

1.4.3 热导率计算

最后采用傅里叶定律计算硅橡胶的热导率,即公式(1)。进而最终获得硅橡胶材料的热导率 $K_f = 0.15 \text{ W/(m} \cdot \text{K)}$ 。

2 案例实践报告

根据硅橡胶材料热导率模拟计算案例所学内容,分析RNEMD方法的基本原理,讨论采用RNEMD方法计算热导率的影响因素及规律。

在硅橡胶材料热导率模拟计算案例中,将课程上所计算的热流通量和温度分布图相关数据进行记录,通过线性拟合方法获得温度梯度,进而计算热导率。课后采用类似的方法模拟丁苯橡胶的热导率。

高分子复合材料热导率的影响因素很多,通

过文献查阅等方式从分子链结构、填料网络、界面等角度讨论影响高分子复合材料热导率的因素。

3 案例实践效果

“硅橡胶材料热导率的模拟计算”案例已经在面向材料科学与工程学院各专业的“材料模拟与计算创新实训”课程中进行教学实践,取得以下教学效果:

(1)通过案例设计与实践教学相结合,对计算流程过程中涉及的力场选择与赋予、牛顿运动方程、模拟步长选择、系综选择、周期性边界条件等分子动力学模拟的基础知识进行进一步巩固与提高,有效帮助学生进一步深入理解与巩固基础知识。

(2)学生通过模拟软件实现硅橡胶分子链多层次结构的理论模拟与可视化展示,通过自主建立硅橡胶分子模型、设置力场参数、运行能量最小化与动力学平衡等过程,直观观察了分子链重复单元分子结构、分子链构象和聚集态结构,帮助学生硅橡胶分子链三维结构有深入的理解,突破书本知识的抽象性,同时让学生了解可以根据实际所需来设计不同结构的分子链。

(3)硅橡胶材料热导率的模拟计算案例涉及高分子物理、高分子化学、计算机等多学科知识,充分运用反向非平衡分子动力学模拟的技术优势,同时需要掌握软件操作与数据处理等技术,最终获得硅橡胶的热导率。通过实验与模拟比较使学生深刻认识到模拟是“基于模型的实验”,从而能理性评判计算结果的可靠性。

(4)该案例使得学生一方面掌握采用分子动力学模拟来获得硅橡胶热导率的模拟方法,同时培养了学生采用多学科知识融合思维来解决实际问题的能力,为未来科研训练提供了一个很好的训练案例及发展潜力。此外,该案例也显著提升了学生学习过程中解决问题的能力,为未来从事科学研究奠定了一定基础。

4 结语

围绕“材料模拟与计算创新实训”课程教学,本工作构建了一个简单、高效的硅橡胶热导率模拟计算案例的设计与实践。案例设计内容包括硅橡胶材料原子模型的构建与优化、动力学平衡、热导率计算部分。通过案例设计与实践学习,让学生更深入理解结合分子模拟技术来研究硅橡胶热

导率的模拟方法,利用计算机对硅橡胶材料重复单元、分子链、聚集态结构进行可视化可更加清晰认识硅橡胶材料的多尺度复杂结构,帮助学生建立起硅橡胶材料微观结构与宏观热导性能关系的认识,进而构建了从原子到性能的系统性工程思维框架。通过亲身的软件操作和数据分析技术,不仅加深了对分子动力学模拟基础知识的理解,同时培养学生对软件的实践操作,增强了硅橡胶模拟研究工具的掌握,也激发了面向未来技术的前沿探索与创新潜能,有效改善了教学效果。

参考文献

- 1 Zhang, W. F.; Li, H. X.; Jiang, H. Y.; Wu, H. Y.; Lu, Y. L.; Zhao, X. Y.; Liu, L.; Gao, Y. Y.; Zhang, L. Q. Influence of surface defects on the thermal conductivity of hexagonal boron nitride/poly(dimethylsiloxane) nanocomposites: a molecular dynamics simulation. *Langmuir*, **2021**, 37(41), 12038–12048.
- 2 Ma, R. B.; Wang, Y. L.; Huang, H. R.; Zhao, X. Y.; Li, X. L.; Zhang, L. Q.; Gao, Y. Y. Insight into the fracture properties and molecular mechanism of polyurethane. *Macromolecules*, **2024**, 57(9), 4484–4494.
- 3 Li, H. X.; Wang, Y. M.; Zhang, W. F.; Ma, R. B.; Zhao, X. Y.; Liu, X.; Zhang, L. Q.; Gao, Y. Y. Structure, dynamics, and rheological behavior of associative polymers formed by hydrogen bonds. *Macromolecules*, **2024**, 57(3), 1106–1117.
- 4 Gao, Y. Y.; Wu, Y. P.; Liu, J.; Zhang, L. Q. Effect of chain structure on the glass transition temperature and viscoelastic property of *cis*-1, 4-polybutadiene via molecular simulation. *J. Polym. Sci. Part B Polym. Phys.*, **2017**, 55(13), 1005–1016.
- 5 张树永, 朱亚先, 霍冀川, 宋丽娟, 徐华龙, 郑兰荪. 高校化学类专业开展新工科建设的建议. *大学化学*, **2020**, 35(10), 6–10.
- 6 2013~2017年教育部高等学校化学类专业教学指导委员会. 化学类专业化学实验教学建议内容. *大学化学*, **2017**, 32(8), 1–3.
- 7 雷洪, 霍冀川, 张廷红, 黄鹤燕. 新工科背景下“化学综合设计实验”课程改革. *大学化学*, **2021**, 36(4), 203–206.
- 8 Zhang, M. M.; Lussetti, E.; de Souza, L. E. S.; Müller-Plathe, F. Thermal conductivities of molecular liquids by reverse nonequilibrium molecular dynamics. *J. Phys. Chem. B*, **2005**, 109(31), 15060–15067.
- 9 Müller-Plathe, F. A simple nonequilibrium molecular dynamics method for calculating the thermal conductivity. *J. Chem. Phys.*, **1997**, 106(14), 6082–6085.
- 10 McQuaid, M. J.; Sun, H.; Rigby, D. Development and validation of COMPASS force field parameters for molecules with aliphatic azide chains. *J. Comput. Chem.*, **2004**, 25(1), 61–71.