

分子模拟技术在新型催化剂设计中的应用

梁 坤¹ 周 军^{1,2} 吴 雷^{3*} 宋永辉^{2,3} 田宇红^{1,2} 付义乐¹

(1.西安建筑科技大学化学与化工学院,西安 710055;2.陕西省冶金工程技术研究中心,西安 710055;
3.西安建筑科技大学冶金工程学院,西安 710055)

摘 要 分子模拟技术能高效、便捷地研究催化材料的表面分子间微观作用机理、分子结构及性能等,为提升催化材料性能和优化制备工艺提供可靠的依据。分子模拟技术的应用不仅能极大地缩短催化材料的研发周期,而且有效控制了研发成本。Materials Studio 软件是应用最为广泛的分子模拟软件,可用于催化材料的能量、结构、力学和光学性能及热力学和动力学等方面的计算。首先综述了 Materials Studio 软件在材料科学领域的应用现状,再详细介绍了该软件在协助新型催化剂设计中的应用,最后,总结了分子模拟技术现存问题和在催化领域的应用前景。

关键词 分子模拟, Materials Studio 软件, 新型催化剂, 设计与模拟

Application of molecular simulation technique on new catalyst design

Liang Kun¹ Zhou Jun^{1,2} Wu Lei³ Song Yonghui^{2,3} Tian Yuhong^{1,2} Fu Yile¹

(1.School of Chemistry and Chemical Engineering, Xi'an University of Architecture and Technology, Xi'an 710055; 2.Research Centre of Metallurgical Engineering & Technology of Shaanxi Province, Xi'an 710055; 3.School of Metallurgical Engineering, Xi'an University of Architecture and Technology, Xi'an 710055)

Abstract Microscopic mechanism, molecular structure and catalytic materials properties were efficiently and conveniently studied by molecular simulation technology, in which was a reliable support for selectivity of catalytic performance and preparation path. Its application could not only greatly shorten the development cycle of catalytic material, but effectively control the economic cost. Materials Studio software, a most widespread application software for molecular simulation, was used in energy calculation, structural optimization, mechanical calculation, optical calculation, and thermodynamic and dynamic calculation of catalyst. The application status of Materials Studio software in the field of materials science was firstly stated, then reviewed its assisted application in catalyst design process. Finally, the current problems of molecular simulation technology and further application space in the catalytic field were also concluded.

Key words molecular simulation, Materials Studio software, new catalyst, design and simulation

随着计算机技术、理论物理和理论化学的飞速发展,以量子力学和分子力学为基础的分子模拟技术得到进一步提升。分子模拟技术是基于实验事实,利用理论方法和计算机技术,模拟分子的微观结构和微观运动,分析和预测分子参数和性能的新兴计算化学技术,被广泛应用在生物、材料、物理、化学等多个领域^[1-2]。利用分子模拟技术协助催化剂在化学反应路径、过渡态、反应机理和性能等方面的研

究,代替了传统化学合成、结构分析和物理检测等方法,使催化剂更具有选择性,降低了新型催化剂的研制周期和开发成本^[3],已成为催化剂设计与模拟过程中不可或缺的手段,极大推动了催化科学的发展。

在分子模拟过程中,需要计算机模拟软件做技术支撑,目前常用的计算模拟软件有 Materials Studio、Discovery Studio、ANASYS、Amber 和 GULP 等,其中 Materials Studio 作为多尺度分子模拟平

基金项目:国家自然科学基金(51774227 和 21607118);陕西省自然科学基金基础研究计划陕煤联合基金项目(2019JLP-17 和 2019JLM-42);陕西省国际科技合作计划项目(2019KW-049)

作者简介:梁坤(1994-),男,硕士研究生,主要研究方向为低阶煤清洁分级利用及煤化工领域数值模拟计算。

联系人:吴雷,工程师,主要从事低阶煤清洁分级利用及金属催化剂设计与制备研究。

台,为基础计算和理论分析提供了可靠的依据。Materials Studio 应用多种研究方法和功能模块,从微观-介观-宏观尺度研究材料的原子结构、过渡态和性能。Li 等^[4]采用密度泛函理论和 Materials Studio 软件研究了 Mg^{2+} 和 Ca^{2+} 对黄铜矿中(001)面 S 元素表面的影响,他们发现 Mg^{2+} 和 Ca^{2+} 分别与黄铁矿生成了稳定的 S-Mg-SO₄-Fe 结构和 Ca-SO₄-Fe 结构,导致黄铜矿浸出率降低。Xiao 等^[5]和陈磊等^[6]利用 Materials Studio 软件研究 Nafion 膜中水离子和水合氢离子的介观转移特性,研究发现,Nafion 膜上的磺酸基的吸附水为水合氢离子的转移提供了通道,膜中高水分含量和高温度增大了水合氢离子的传递系数,增加了转移通道数量,加快了水合氢离子的运动。

基于 Materials Studio 软件在材料学研究中的各种优势,其在催化领域的应用也得到了广泛关注,例如分子筛催化剂^[7-9]、乙烯加氢催化剂^[10]等。笔者查阅大量文献之后,发现尚未有 Materials Studio 软件关于催化剂设计应用进展的报道,因此介绍了 Materials Studio 软件的应用现状,较为详细地梳理了 Materials Studio 软件在催化剂研究中的应用,总结了分子模拟技术的现存问题和在催化领域的研究前景。

1 Material studio 软件的应用现状

Materials Studio 软件拥有先进的模拟计算方法,可准确构建所需结构和体系的模型,完成模型计算、合成模拟、物理/化学性质分析及性能预测等。Materials Studio 软件主要应用于分子力学与分子动力学、量子力学、晶体/结晶与 X 射线衍射、高分子与介观模拟以及定量结构-性质关系等方面。

1.1 分子力学与分子动力学应用

Amorphous Cell 模块是采用蒙特卡洛研究方法搭建的无定型模型建模程序,可快速建造分子模型和预测主要性质。Wang 等^[11]研究了 SiO₂ 在硅酸-硫酸钠水溶液体系中的后期聚合行为,采用 Amorphous Cell 模块、Forcite 模块和 Dreiding 模块对胶体溶液中粒子进行结构优化,优化后的胶体溶液密度约为 1g/cm³,硅酸、硫酸钠和水分子粒子直径为 4.9Å、3.7Å 和 1.5Å,并且随机分布在模拟的胶体溶液中。崔青等^[12]在进行降黏机理的分子动力学模拟时,采用 Amorphous Cell 模块建立 298K 时动力学最优的周期性边界体系,推断出在稠

油降黏过程中,四元聚合物相比于三元聚合物更有优势。

Discover 模块是在第一性原理的基础上对构建的物质模型进行分子动力学计算的程序,能够准确地计算出最低能量构象,精确计算粒子的运动路径。刘建国等^[13]为了模拟不同热处理温度对聚乙烯醇力学性能的影响,采用 Discover 模块,在 NVT 系统中计算不同温度的动力学参数,模拟结果表明,373K 热处理温度下所得聚乙烯醇的泊松比、柯西压和 K/G 值均最大,弹性伸长最好,延展性最强,力学性能最佳。

COMPASS 模块是参数化的从头算力场程序,能精确预测在很大温度和压强范围内,多种孤立体系和凝聚态分子的结构、构象、振动和热力学性质。Chen 等^[14]构建了氩气、水、氟利昂和铜的固、液和气三相模型,利用 COMPASS 模块研究了在固体壁上多原子和极性水分子凝聚过程中各体系的能量分布。Eric 等^[15]通过对比实验发现热漫散射实验数据对验证分子力学力场或模拟参数十分有用,特别是考虑到分子晶体动力学特性准确性的情况下,他们还发现 Materials Studio 软件中 TMFF 和 COMPASS 模块的模拟结果与实验结果一致性最好。

1.2 量子力学应用

CASTEP 模块是基于密度泛函理论的从头算计算程序,根据原子数目和种类来预测分子参数,例如晶胞尺寸、结构对称性、能带结构等。Rajitha 等^[16]利用 CASTEP 模块计算高能物质 TEX(C₆H₆N₄O₈)的分子结构和振动频率,计算结果与拉曼光谱实验结果较一致,验证了 CASTEP 模块计算的准确性。Li 等^[17]采用 CASTEP 模块对黑云母矿物进行了多位点表面络合建模,模拟结果表明,黑云母矿物表面存在 3 种吸附位点,且这 3 种吸附位点密度量级不同。

Dmol³ 模块是基于密度泛函计算,对物质的反应过程进行模拟研究的程序。Abu-Melha 等^[18]合成了 2-安吉-5-芳唑噻唑系列衍生物,利用 Dmol³ 模块对其几何结构进行优化,为进一步性能研究提供了基础。Jiang 等^[19]以 Arrhenius 方程为基础,建立了超临界水氧化过程的温度依赖性定量构效关系模型,用 Dmol³ 模块对 Kohn-Sham 轨道进行扩展,最优模型回归和模型验证较为理想,具有较好的稳定性。

1.3 晶体/结晶与 X 射线衍射应用

Reflex 模块和 Reflex Plus 模块可以对晶体材料多种粉末衍射图谱进行模拟分析,确定微观分子结构。Shi 等^[20]采用 X 射线衍射、差示量热、热重以及红外光谱等技术对医用高分子材料进行了测试,运用 Reflex 和 Reflex Plus 模块确定了非诺贝特分子的 4 种不同晶体结构。李丽丽等^[21]在构建聚乙烯/蒙脱土纳米复合材料的模型过程中,利用 Reflex 模块对材料进行 X 射线照射模拟分析,最终衍射结果以粉末衍射的形式输出,计算的蒙脱土片层间距值(13Å, 20Å)与文献值(13Å, 19~29Å)相吻合,模拟结果较为准确。

1.4 高分子与介观模拟应用

Mesocite 模块是以粗粒化分子动力学和耗散粒子动力学为基础,研究软凝聚态材料的介观模拟程序。Song 等^[22]基于耗散粒子动力学计算方法,利用 Mesocite 模块设计了尺寸可调的二维纳米孔膜,孔膜是厚度从 2.5nm 到 7.8nm 双层结构,结构十分稳定,膜上纳米孔的孔径从 2.45nm 到 6.15nm,并发现聚合物的浓度、接枝长度和两性分子纳米片的亲和力影响纳米孔的孔径大小。Santo 等^[23]提出了一个粗粒度耗散粒子动力学模型,研究多价阳离子存在时聚合物浓缩溶液的形态学和流变特性,研究发现,溶液黏度与金属离子浓度的变化成正相关,而与剪切速率的变化成负相关,模拟结果与已有文献数据基本吻合。

MesoDyn 模块是基于平均场密度泛函理论计算方法的介观尺度模拟程序,可用来研究复杂流体的动力学性质、平衡态结构等体系。Wu 等^[24]利用 MesoDyn 模块计算发现在聚乙烯醇/聚乙烯醇吡咯烷酮共混物中,由于氢键的焓贡献,混合物能以任意质量分数混合。Rakkapao 等^[25]也研究了共混体系的相容性,他们发现在壳聚糖/聚环氧乙烷(CS/PEO)共混物中,随着 PEO 含量的增加,相混合互溶性降低,但当 PEO 质量分数低于 58%时,方能得到两者的共混物,模拟结果与实验值相接近。

1.5 定量结构-性质关系应用

QSAR 模块是通过建构材料的实验信息和分子水平特征之间统计回归数学模型程序,用于对未知材料性质的预测。Mirchi 等^[26]研究喹唑啉-4(3H)-1 及其目标转移酶的富勒烯衍生物之间的结合作用时,开发了量子化学模型与 QSAR 模型相结合的计算模式,模拟计算结果与实验数据一致,可用

于新型选择性抑制剂的设计。Zhu 等^[27]在含偶氮染料、杂环化合物和离子化合物等 32 种物质的有机体系中建立了定量结构-活性关系模型,实验结果验证了模型能准确预测所有化合物的降解速率,具有最佳的稳定性和可靠性。

综上所述,Materials Studio 软件是一款性能强大的模拟设计软件,可用于能量、结构、力学、光学以及热力学和动力学等方面的计算研究,被广泛应用于材料学、材料表界面、化学反应、晶体结构和形貌、燃料电池、膜材料等领域的分析计算。此外,软件新功能模块的开发不断地拓展其应用范围。

2 Material studio 软件在催化剂设计中的应用

现代催化科学的研究除了催化剂表征测试、催化活性评价、使用寿命、毒性和宏观动力学分析等外,还应加强对分子模拟技术的应用。Material studio 软件可在微观-介观-宏观尺度对催化剂的活性和选择性进行模拟计算,通过计算分子结构、热力学/动力学、力学、表面吸附态的程序升温脱附、光谱、能谱等参数,选择性地设计和开发新型催化剂,加快研发进程,缩短研发周期。根据 Materials Studio 软件的主要功能,软件可协助催化剂在结构表征、合成设计、性能分析等方面的研究应用。

2.1 催化剂的结构表征

Tokarský 等^[28]采用水热合法制备了光敏石英砂/TiO₂ 复合材料,利用 Materials Studio 软件研究了环境中石英表面 TiO₂ 粒子的结构顺序。他们采用 Forcite 模块计算原子电荷和优化分子模型,优化后的纳米 TiO₂ (001) 颗粒表现出强的粘附力,而纳米 TiO₂ (110) 颗粒的吸附能力较弱,间接证明了原子结构中 Ti—O—Si 键的存在。在 SiO₂ 表面锚定 TiO₂ 纳米颗粒并不影响其的光催化活性,这种 Si-Ti 复合材料将是非常有前景的建筑材料。

Praus 等^[29]制备由 ZnS 壳包裹 CdS 核的纳米颗粒,并模拟计算了优化后的 ZnS/CdS 纳米颗粒壳层厚度和核半径。研究表明,CdS 核的平均半径为 2.619nm,1、2 和 3 层 ZnS 壳的平均厚度分别为 0.353nm、0.408nm 和 0.403nm,与理论上 ZnS 分子层厚度 0.31nm 相差不大。CdS/ZnS 纳米粒子在胶体中的 UV-Vis 吸收光谱计算跃迁能、Cd 核内电子和空穴穿过 ZnS 壳层的应变迟豫和 ZnS 壳层结构的应变迟豫的实验结果与模型预测是一致的,

说明了模拟方法的有效性。

吴一敏等^[30]研究了 Li/MgO 复合催化剂中 Li 含量对丙烷氧化脱氢制烯烃反应的影响,并利用 Materials Studio 软件计算了吸附状态的丙烷分子在 Li/MgO 复合催化剂表面所占据的空间体积。研究发现,随着 Li 含量的增大,复合催化剂的催化活性呈先增加后减少的变化趋势,当 Li 含量为 3% 时,丙烷转化率最高,可达 53.6%。引起这种变化的原因是 Li^+ 进入 MgO 晶格,形成了 Li^+-O^- 缺陷位,增大了催化活性,但随着 Li 含量的增大,无催化活性的 Li_2CO_3 在 MgO 表面大量生成,使得催化活性降低。

2.2 催化剂的合成设计

降低 Pt 催化剂的粒径是一种有效提高 Pt 催化剂在燃料电池中用于氧化还原反应利用率的方法,然而当 Pt 粒子粒径小于 2.6nm 时,催化剂中毒和表面氧化导致利用率只有 20%。因此,Xiao 等^[31]采用 Dmol³ 模块开发了一个核壳结构的 $\text{Al}_{13}@\text{Pt}_{42}$ 簇作为氧化还原反应的催化剂,生成 Al-Pt 共价键具有极好的簇稳定性和较高的氧吸附能,表现出更高的活性。 $\text{Al}_{13}@\text{Pt}_{42}$ 催化剂中 Pt 原子边缘吸附—OH 是良好的解毒剂,将 Pt 原子利用率提高到 70%。 O_2 解离机制的限速步骤是—O 和—H 生成—OH 和—OOH 反应,生成—OH 的活化能低于—OOH 的活化能,前者占主导地位。

Cheng 等^[32]通过 Dmol³ 模块设计了 Cu_3 簇修饰的 Mo_2CO_2 分子催化剂,在环境温度下分析了 Cu 的粘合力、对应基板上形成 Cu_3 簇的结合能、基板的氧化和 CO 中毒条件、CO 气氛下的稳定性以及基板上 CO 的氧化等。 Cu_3 簇修饰的 Mo_2CO_2 分子是 CO 氧化反应的优良催化剂,催化氧化反应机理是 Cu_3 簇的活性位点具有提供电子和接受电子的能力,而介导反应有利于 OOCO 中间体的生成,催化了 CO 氧化反应。

2.3 催化剂的性能分析

李赏等^[33]研究了纳米级 $\text{Co}_3\text{O}_4/\text{C}$ 催化剂在酸性环境下的催化氧化反应性能,利用 Materials Studio 软件分析和计算氧吸附过程中氧原子和钴原子周围电子结构的变化情况,O 原子 2p 轨道上电子与催化剂表面 Co 原子 3d 轨道上电子相互作用,Co 原子周围的电子向 O 原子周围移动,从而导致氧原子吸附端富集了大量的电子。在 $\text{Co}_3\text{O}_4/\text{C}$ 催化剂表面,活性位点的端基吸附氧原子,而氧原子二电子

反应生成的 H_2O_2 加速了高分子链在质子交换膜和催化层中的降解。

刘子传等^[34]将 Ag^+ 、 Fe^{3+} 、 Pt^{4+} 和 La^{3+} 离子掺杂到纳米 TiO_2 颗粒,并使用 Dmol³ 和 CASTEP 模块计算掺杂改性纳米颗粒的能带结构和光吸收系数。无掺杂的纳米 TiO_2 颗粒的禁带宽度为 2.06eV,而掺杂 Ag^+ 、 Fe^{3+} 、 Pt^{4+} 和 La^{3+} 的纳米 TiO_2 颗粒的禁带宽度分别为 1.09eV、1.29eV、1.41eV 和 0.89eV,改性后的纳米 TiO_2 颗粒的禁带宽度变窄,尤其是掺杂 Ag^+ 和 La^{3+} 离子的。无掺杂金属离子的纳米 TiO_2 颗粒的光吸收波长几乎不超过 388nm,而掺杂后的纳米 TiO_2 颗粒吸收波长发生红移。光吸收强度的增大生成了更多的电子-空穴,提高了纳米 TiO_2 颗粒的光催化性能。

王庆宝等^[35]利用密度泛函理论对 N、Fe 和 La 原子掺杂 TiO_2 的微观结构进行研究,从微观尺度上分析了 N、Fe 和 La 元素对 TiO_2 光催化性能的影响。N 和 Fe 原子与 Ti、O 原子的轨道耦合杂化,导致了 TiO_2 晶格畸变,降低了电子跃迁所需能量,在可见光范围内可激发原子跃迁,增加了光生电子-空穴对的分离,提高了光催化活性。而掺杂 La 原子使 TiO_2 的电子态数量增加,提高了 TiO_2 的光催化活性。Li 等^[36]同样研究了杂原子掺杂 TiO_2 的微观结构和光学性能,掺杂杂质原子导致 TiO_2 晶格畸变,晶格常数减小,增强了 TiO_2 对可见光的吸收能力,得出了与王庆宝研究相似的结论。

3 结语

随着分子模拟技术的不断完善,分子模拟技术将更高效地应用于高分子、材料催化、药物设计和石油化工等领域。然而,计算机模拟的运算速度、分子力场参数的选择和优化等制约着分子模拟技术的发展,减缓了分子模拟技术对纳米级以下空间和时间尺度物理模型的研究进程。目前,分子模拟技术软件还未能普及应用,功能较为全面的模拟软件均为商业软件,不仅价格较为高昂,而且软件操作较为复杂,很难在短时间内熟练应用。因此,在计算机科学进一步发展的基础上,开发操作简便、价格适宜的分子模拟软件是分子模拟技术推广应用的必要条件。

分子模拟技术在催化剂设计中的应用是目前较为新颖的研究方向。在催化剂分子结构研究中,催化剂分子键长、键角、键能的计算有助于分析催化剂的反应活性;在催化合成路径的选择研究中,了解催

化剂与初始态、过渡态之间的催化作用机理,改善催化反应条件可有效促进产物合成,提高合成物的产率;在催化剂性能设计研究中,探明催化剂分子的电子密度分布、结构形貌、表面吸附力等与性能之间的内在规律,针对性地设计催化剂,降低催化剂的研发时间和经济成本。因此,分子模拟技术是一种高效、节能的研究催化剂的技术,符合催化剂发展研究的需求,在催化剂研究领域必将有着广阔的应用前景。

参考文献

- [1] Ahmad Z U, Chao B, Konggidinata M I, et al. Molecular simulation and experimental validation of resorcinol adsorption on ordered mesoporous carbon(OMC)[J]. *Journal of Hazardous Materials*, 2018, 354: 258-265.
- [2] Lei Z, Yang D, Zhang Y H, et al. Constructions of coal and char molecular models based on the molecular simulation technology[J]. *Journal of Fuel Chemistry and Technology*, 2017, 45(7): 769-779.
- [3] 庄昌清, 岳红, 张慧军. 分子模拟方法及模拟软件 Material Studio 在高分子材料中的应用[J]. *塑料*, 2009, 39(4): 81-84.
- [4] Li Y B, Wei Z L, Xiao Q, et al. A fundamental DFT study of chalcopyrite surface evolution due to impurity divalent ions during leaching process[J]. *Minerals Engineering*, 2018, 121: 205-211.
- [5] Xiao J Y, Yan D, Li J, et al. Hydronium ions diffusion behavior in nafion membrane by mesoscopic simulation[J]. *AIP Advances*, 2018, 8(7): 1-12.
- [6] 陈磊, 林鸿, 陶文栓. 温度对质子交换膜扩散性能影响的分子动力学模拟[J]. *西安交通大学学报*, 2011, 45(7): 1-4.
- [7] Yoshihiro S, Ajayan V. Alkylation of biphenyl over zeolites: shape-selective catalysis in zeolite channels[J]. *Catalysis Surveys from Asia*, 2015, 19(3): 188-200.
- [8] Al-Khattaf S S, Ali S A, Aitani A M, et al. Catalysis of metal supported zeolites for dealkylation-transalkylation of alkyl-aromatics[J]. *Applied Catalysis A: General*, 2016, 514: 154-163.
- [9] 李玲玲, 聂小娃, 宋春山, 等. H-ZSM5 分子筛催化二甲苯异构化的反应机理[J]. *物理化学学报*, 2013, 29(4): 754-762.
- [10] 高源, 曹建明, 王生伟, 等. 用化工软件研究碳二前加氢催化剂及其工艺[J]. *化工新型材料*, 2012, 40(3): 46-48.
- [11] Gholizadeh R, Wang Y J. Molecular dynamics simulation of the aggregation phenomenon in the late stages of silica materials preparation[J]. *Chemical Engineering Science*, 2018, 184: 62-71.
- [12] 崔青, 张长桥, 修建新, 等. 稠油沥青胶质降粘机理的分子动力学模拟[J]. *山东大学学报(工学版)*, 2017, 47(2): 123-130.
- [13] 刘建国, 安振涛, 张倩, 等. 热处理工艺对聚乙烯醇力学性能影响的分子模拟研究[J]. *四川大学学报(自然科学版)*, 2018, 55(3): 559-563.
- [14] Chen L, Chen P F, Li Z Z, et al. The study on interface characteristics near the metal wall by a molecular dynamics method[J]. *Computers and Fluids*, 2018, 164: 64-72.
- [15] Eric J C, Marcus A N. Evaluation of general and tailor made force fields via X-ray thermal diffuse scattering using molecular dynamics and monte carlo simulations of crystalline aspirin[J]. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 2018, 14: 2165-2179.
- [16] Rajitha R, Ramamoorthy R T, Venkatesan V, et al. New high pressure phases of energetic material TEX: evidence from Raman spectroscopy, X-ray diffraction, and first-principles calculations[J]. *Journal of Physical Chemistry*, 2018, 122(30): 6236-6242.
- [17] Li X D, Puhakka E, Ikonen J, et al. Sorption of Se species on mineral surfaces, part I: batch sorption and multisite modeling[J]. *Applied Geochemistry*, 2018, 95: 147-157.
- [18] Abu-Melha S. Design, synthesis and DFT/DNP modeling study of new 2-Amino-5-arylazothiazole derivatives as potential antibacterial agents[J]. *Molecules*, 2018, 23: 434.
- [19] Jiang A, Cheng Z W, Shen Z M, et al. QSAR study on the removal efficiency of organic pollutants in supercritical water based on degradation temperature[J]. *Chemistry Central Journal*, 2018, 12: 16.
- [20] Shi X J, Shao Y H, Sheng X X. A new polymorph of fenofibrate prepared by polymer-mediated crystallization[J]. *Journal of Crystal Growth*, 2018, 498: 93-102.
- [21] 李丽丽, 张晓虹, 王玉龙, 等. 基于聚乙烯/蒙脱土纳米复合材料微观结构的力学性能模拟[J]. *物理学报*, 2016, 65(19): 196-202.
- [22] Song X Y, Guo H, Tao J B, et al. Design of tunable-size 2D nanopore membranes from self-assembled amphiphilic nanosheets using dissipative particle dynamics simulations[J]. *Chemical Engineering Science*, 2018, 189: 75-83.
- [23] Santo K P, Vishnyakov A, Kumar R, et al. Elucidating the effects of metal complexation on morphological and rheological properties of polymer solutions by a dissipative particle dynamics model[J]. *Macromolecules*, 2018, 51(14): 4987-5000.
- [24] Wu H, Xin Y. Molecular dynamics and MesoDyn simulations for the miscibility of polyvinyl alcohol/polyvinyl pyrrolidone blends[J]. *Plastics Rubber and Composites*, 2017, 46(2): 69-75.
- [25] Rakkapao N, Visit V S. Molecular simulation and experimental studies of the miscibility of chitosan/poly(ethylene oxide) blends[J]. *Journal of Polymer Research*, 2014, 21(12): 606.
- [26] Mirchi A, Sizochenko N, Leszczynski J. Fullerene quinazolinone conjugates targeting mycobacterium tuberculosis: a combined molecular docking, QSAR, and ONIOM approach[J]. *Structural Chemistry*, 2018, 29(3): 765-775.