

## <<分子模拟与高分子材料>>

### 图书基本信息

书名：<<分子模拟与高分子材料>>

13位ISBN编号：9787030096067

10位ISBN编号：7030096061

出版时间：2003-7

出版时间：科学出版社发行部

作者：杨小震

页数：336

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问：<http://www.tushu007.com>

## <<分子模拟与高分子材料>>

### 内容概要

本书介绍了近年来飞速发展的令世人瞩目的新技术——“分子模拟”的基本原理，分子模拟中的有效方法，以及其在高分子材料的研究与设计中的应用。

其中主要介绍的是通过计算机从原子水平上描述、模拟高分子材料，提示高分子材料的化学结构与材料宏观性质的关系。

对于国内外流行的分子模拟软件，如MP和CERIUS2等也做了相应的介绍。

## &lt;&lt;分子模拟与高分子材料&gt;&gt;

## 书籍目录

第一章 分子模拟概论1.1 新领域1.2 原子水平的模拟1.3 计算机实验1.4 检验理论筛选实验1.5 第三种科学研究的方法第二章 分子力场2.1 振动光谱与力常数2.2 内坐标2.3 光谱力常数力场2.4 经验势函数力场2.5 电荷平衡法参考文献第三章 分子力学方法3.1 基本原理3.2 结构优化方向3.3 体系边界3.4 体系的压强参考文献第四章 分子动力学方法4.1 基本原理4.2 数值算法4.3 抽样统计与宏观性质4.4 统计系综的实现4.5 体系的外力场参考文献第五章 分子蒙特卡洛法5.1 真实分子蒙特卡洛法5.2 旋转异构态蒙特卡洛法参考文献第六章 介观尺度模拟6.1 介观尺度的计算机模拟6.2 动态平均场密度泛函法6.3 软粒子动力学法参考文献第七章 分子模拟软件 (MP) 7.1 概述7.2 软件的功能7.3 文件与分子结构7.4 计算方法7.5 分析方法第八章 分子识别与催化剂的选择性8.1 分子识别手性六螺烯8.2 不对称催化反应的分子模拟8.3 茂金属催化丙烯聚合的头尾选择性参考文献第九章 催化剂活性的预报9.1 中心金属的净电荷9.2 受限几何催化剂9.3 不同硅桥联茚基全同立构聚丙烯金属茂催化剂9.4 超支化催化剂9.5 非桥联钨茂催化剂的温度效应参考文献第十章 高分子链构象态的跃迁10.1 低能量通道及侧基的协同取向行为10.2 聚甲基丙烯酸三苯甲基酯螺旋分子链的构象态跃迁10.3 高分子构象态跃迁机理参考文献第十一章 高分子链的局部构象与统计尺寸的预报11.1 侧基取向模型11.2 聚丙烯酰胺11.3 聚(3-乙基噻吩)参考文献第十二章 高性能树脂的性能预报12.1 高分子晶体结构的模拟12.2 力学性质的模拟参考文献第十三章 高分子玻璃态的运动与玻璃化转变13.1 聚合物玻璃态的分子运动从单键到多键单元的特征13.2 聚合物在玻璃化转变前后的构象态跃迁行为13.3 高玻璃化转变温度材料的估算参考文献第十四章 高分子链的结晶行为14.1 模拟方法和模型14.2 聚乙烯链在结晶过程中形态的变化14.3 结晶过程中体系的能量变化14.4 单链的内聚阶段和本体的晶体熔融过程14.5 结晶过程中回转半径的变化14.6 片晶的扭动参考文献第十五章 聚合物的共混15.1 热力学基础15.2 描述聚合物溶液的理论15.3 描述聚合物共混的理论15.4 模拟分子间相互作用参数参考文献第十六章 高分子受限链的熵与焓16.1 RIS蒙特卡洛法16.2 单分子链的玻璃态16.3 高分子的链构象分布参考文献第十七章 高分子的构象弹性17.1 构象弹性的原理17.2 构象弹性的理想形变行为17.3 链构象态分布函数17.4 形变中的自由能17.5 简单拉伸17.6 橡胶大形变的物理17.7 化学结构对形变的影响17.8 内能项弹性力17.9 聚合物的构象弹性的理论张力17.10 温度依赖性参考文献第十八章 分子光谱的预报18.1 从分子动力学到振动光谱18.2 高分子液态拉曼光谱的模拟参考文献

<<分子模拟与高分子材料>>

版权说明

本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问:<http://www.tushu007.com>