

<<分子模拟>>

图书基本信息

书名：<<分子模拟>>

13位ISBN编号：9787502539528

10位ISBN编号：7502539522

出版时间：2002-9

出版时间：化学工业出版社

作者：（荷）弗兰克Frenkel等

页数：417

字数：363000

译者：汪文川等

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>>

### 内容概要

分子模拟方法（包括Monte Carlo方法和分子动力学方法）在物理、化学及材料学科等领域常常被称为“计算机实验”，它已经成为和实验科学、理论科学并列的自然科学的第三分支。

本书介绍了基本原理，包括统计力学、Monte Carlo 模拟以及分子动力学模拟；然后介绍系综，包含不同系综的Monte Carlo 模拟以及不同系综的分子动力学模拟；再介绍相平衡，包含自由能计算、无界面相共存以及固体的相平衡；最后介绍高等方法，包含约束、稀有事件、簇移动、复杂流体以及链状分子的自由能。

本色适合作为研究生以及高年级本科生的教材，也可作为从事分子模拟研究的教师的参考书。

## &lt;&lt;分子模拟&gt;&gt;

## 书籍目录

1 概述 第一部分 基本原理 2 统计力学 2.1 熵及温度 2.2 经典统计力学 3 Monte Carlo 模拟 3.1 Monte Carlo方法 3.2 基本M Monte Carlo算法 3.3 尝试移动 3.4 应用 4 分子动力学模拟 4.1 概念 4.2 程序 4.3 运动方程 4.4 混合Monte Carl 4.5 计算机实验 4.6 一些应用 第二部分 系综 5 不同系综的Monte Carlo 模拟 5.1 一般方法 5.2 正则系综 5.3 微正则Monte Carlo 5.4 等温等压系综 5.5 等张力等温系综 5.6 巨正则系综 6 不同系综的分子动力学模拟 6.1 恒温下的分子动力学 6.2 在线优化: Car-Parrinello方法 第三部分 相平衡 7 自由能计算 7.1 热力学积分 7.2 化学势 7.3 其他自由能方法 7.4 伞形抽样 8 无界面的共存相 8.1 Gibbs系综法 8.2 应用 8.3 半巨正则系综 9 含固体的相平衡 9.1 热力学积分 9.2 固体的自由能 9.3 分子因体的自由能 9.4 描绘共存曲线 第四部分 高等方法 10 约束 ..... 11 稀有事件 12 簇移动 13 复杂流体 14 链状分子的自由能 第五部分 附录 附录A 线性响应理论 附录B 长程过程 附录C 节省CPU时间 附录D 统计误差 附录E 积分方法 附录F 参考系 附录G Gibbs系综中的统计力学 附录H 一些通用算法 附录I 聚合物的重叠分布参考文献

<<分子模拟>>

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>