

MỤC LỤC

LỜI NÓI ĐẦU	5
Chương 1 CƠ SỞ CỦA QUÁ TRÌNH MÔ PHỎNG	7
1.1. Bản chất của quá trình mô phỏng trên máy tính	7
1.2. Hệ thống, mô hình và quá trình mô phỏng	8
1.3. Các bước tiến hành quá trình mô phỏng	11
1.4. Ưu điểm và hạn chế của mô phỏng	13
1.5. Thiết kế một program để mô phỏng	14
1.6. Các chi tiết kỹ thuật của quá trình mô phỏng	16
1.7. Các khái niệm cơ bản về cấu trúc của vật liệu lỏng, vô định hình và tinh thể	24
1.8. Các phương pháp tính toán cổ điển và các phương pháp mô phỏng – tính toán lượng tử	33
1.9. Tương quan kích thước - thời gian - phương pháp mô phỏng	34
Tài liệu tham khảo chương 1	36
Chương 2 MỘT SỐ PHƯƠNG PHÁP MÔ PHỎNG CỔ ĐIỂN DÙNG TRONG VẬT LÝ	37
2.1. Phương pháp Metropolis Monte-Carlo cổ điển	37
2.2. Phương pháp động lực học phân tử cổ điển	46
2.3. Giới thiệu phần mềm Lammmps	50
Tài liệu tham khảo chương 2	53
Chương 3 CÁC PHƯƠNG PHÁP MÔ PHỎNG - TÍNH TOÁN LƯỢNG TỬ	54
3.1. Tổng quan về các phương pháp tính từ các nguyên lý ban đầu	54
3.2. Phương pháp HARTREE-FOCK	63
3.3. Phương pháp DFT	65
3.4. Phương pháp động lực học phân tử sử dụng nguyên lý ban đầu	
Tài liệu tham khảo chương 3	74
Chương 4 MÔ PHỎNG CÁC HỆ ĐƠN GIẢN ĐƠN NGUYÊN TỬ	76
4.1. Các khái niệm cơ bản	76
4.2. Một số hệ có tương tác đơn giản thường dùng	78
4.3. Những vấn đề thường được khảo sát khi dùng hệ đơn giản đơn nguyên tử	87
4.4. Mô phỏng cấu trúc và các tính chất nhiệt động học của chất lỏng và vô định hình	87
4.5. Mô phỏng hiện tượng tinh thể hóa	96
4.6. Mô phỏng hiện tượng nóng chảy	102
4.7. Mô phỏng hiện tượng chuyển pha từ lỏng sang vô định hình	115

Tài liệu tham khảo chương 4	120
Chương 5 MÔ PHỎNG VẬT LIỆU KHỐI, VẬT LIỆU CÓ KÍCH THƯỚC NANO VÀ VẬT LIỆU HAI CHIỀU	122
5.1. Điều kiện biên dừng trong mô phỏng vật liệu khối, vật liệu có kích thước nano và vật liệu hai chiều (2D)	122
5.2. Mô phỏng vật liệu khối	124
5.3. Mô phỏng màng mỏng, hạt nano	152
5.4. Mô phỏng vật liệu một lớp nguyên tử (vật liệu hai chiều)	155
Tài liệu tham khảo chương 5	170
Chương 6 MÔ PHỎNG PROTEIN	174
6.1. Tổng quan	174
6.2. Thế tương tác	182
6.3. Các thuật toán cơ bản	206
6.4. Các phương pháp tính năng lượng tự do	214
Tài liệu tham khảo chương 6	224
Chương 7 GIỚI THIỆU VỀ CÁC PHẦN MỀM MÔ PHỎNG PROTEIN BẰNG PHƯƠNG PHÁP ĐỘNG LỰC HỌC PHÂN TỬ CỔ ĐIỂN VÀ CÁC PHẦN MỀM XỬ LÝ DỮ LIỆU	226
7.1. Mô phỏng động lực học phân tử cổ điển ứng dụng cho protein và các hệ sinh học	226
7.2. Các phần mềm mô phỏng động lực học phân tử cổ điển phổ biến	227
7.3. Các phần mềm xử lý dữ liệu mô phỏng	230
7.4. Giới thiệu phần mềm Gromacs	230
Tài liệu tham khảo chương 7	257
PHỤ LỤC	258
Phụ lục 1 Những phần mềm mô phỏng sử dụng các nguyên lý ban đầu	258
Phụ lục 2 Những thuật ngữ tiếng Anh thông dụng	268