

<<分子模拟的理论与实践>>

图书基本信息

书名：<<分子模拟的理论与实践>>

13位ISBN编号：9787122004390

10位ISBN编号：7122004392

出版时间：2007-7

出版时间：化学工业出版社

作者：陈正隆

页数：350

字数：384000

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>

<<分子模拟的理论与实践>>

内容概要

分子模拟技术是一项广泛应用于材料、化学、生化与药物研究的通用技术。通过计算模拟，可以得出实验无法得到的资料，因此该技术应用领域十分广泛。

但由于其公式较多，一直以来都令人感觉深奥难懂。

本书在写作过程中略去公式的繁琐推导，力图结合丰富的应用实例使读者尽快掌握各种模拟方法的精髓。

书中具体介绍了分子力学方法、分子动力模拟、蒙地卡罗计算及布朗动力模拟等方法。

图文并茂，实例生动。

本书适用于从事材料、生物化学以及药学相关专业的研究人员，以及相关专业学生使用。

<<分子模拟的理论与实践>>

书籍目录

第1章 分子模拟的概况 参考文献第2章 力场 2.1 力场简述 2.2 力场作用项的一般式 2.3 常见的力场 2.3.1 MM形态力场 2.3.2 AMBER力场 2.3.3 CHARMM力场 2.3.4 CVFF力场 2.3.5 第二代力场 2.4 涵盖周期表元素的力场 2.5 特殊的力场 参考文献第3章 能量最小化 3.1 势能图与势能面 3.2 函数的极小值 3.3 利用导数求极小值的方法 3.4 一次导数求极值法 3.4.1 最速下降法 3.4.2 共轭梯度法 3.5 二次导数求极值法 3.5.1 牛顿-拉森法 3.5.2 近似牛顿-拉森法 3.5.3 对角线块状牛顿-拉森法 3.6 求分子最低能量构象方法的选择 3.7 能量最小化的应用 3.8 多原子分子振动频率的计算 3.9 以能量最小化方法预测团簇体的大小 参考文献第4章 分子力学的应用 4.1 分子结构与势能面 4.2 势能面的最小值点、最大值点、鞍点 4.3 势能面与化学反应 4.3.1 过渡态结构与反应路径 4.3.2 鞍点与二次区域 4.3.3 决定鞍点的方法 4.4 分子力学计算的热力学性质 4.4.1 构象能 4.4.2 分子的生成焓 4.4.3 反应热与生成焓 4.5 晶体结构的计算 4.6 立体效应 参考文献第5章 分子动力模拟计算的原理 5.1 分子动力计算的基本原理 5.2 牛顿运动方程式的数值解法 5.3 周期性边界条件与最近镜像 5.4 积分步程的选取 5.5 简化单位 5.6 分子动力计算流程 5.7 分子动力计算的初始设定 5.8 定温算法 5.9 系统形状的改变计算 5.10 各种系综的分子动力计算方法参考文献第6章 特殊形态的分子动力学第7章 分子动力计算的应用第8章 分子动力计算的应用实例第9章 长程作用力的计算第10章 蒙地卡罗计算方法第11章 蒙地卡罗计算的应用第12章 蒙地卡罗计算的实例第13章 布朗动力计算方法第14章 耗散粒子动力算法第15章 溶解自由能第16章 生化分子系统的模拟第17章 分子模拟与药物设计附录A 经典运动力学附录B 统计力学附录C 天然存在的氨基酸的结构索引

<<分子模拟的理论与实践>>

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>