

<<软物质的计算机模拟与理论方法>>

图书基本信息

书名：<<软物质的计算机模拟与理论方法>>

13位ISBN编号：9787122081940

10位ISBN编号：712208194X

出版时间：2010-7

出版时间：化学工业出版社

作者：杨小震

页数：301

字数：390000

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>

<<软物质的计算机模拟与理论方法>>

前言

中国化学会计算机化学委员会在陈凯先院士与徐筱杰教授的领导下，致力于在全国推广计算机模拟方法，推动科学研究、技术进步与生产力的发展。

本世纪初我们推出了一套丛书，其中包括《分子模拟与高分子材料》。

经过了近10年的发展，计算机模拟应用的领域扩大了，模拟的方法发展了。

从平衡态到非平衡态，从全原子模型到粗粒化模型，从微观尺度到介观尺度，从模拟方法到理论方法。

各个领域都需要计算机模拟，计算机模拟需要更准确的分子力场。

计算机化学委员会因此推出另一套丛书包括本书，来介绍这个领域模拟方面的一些进展，如何发展合理的分子力场，如何发展介观力场，什么是理论方法，如何运用该法去研究实际问题。

本书讨论的科学问题涉及笔者研究组里的、郭洪霞研究员组里的、严大东研究员组里的、邵学广教授研究组里的和孙淮教授研究组里的研究工作。

计算机化学的战略地位近年来愈显重要。

由于计算机模拟的介入，使得一些实验数据上说不清楚或得不到的结果能够明确得到了。

基于量子力学理论的微观方法，包括分子力学、分子动力学、粗粒化粒子，以及目前尚无坚实理论基础的介观的耗散粒子动力学，直到宏观的有限元方法，我们三个尺度上的模拟方法与理论方法。

要突破时间尺度与空间尺度的限制，我们必须把微观、介观与宏观三个尺度上的模拟方法贯穿起来才能符合新材料发展的需求。

韩志超先生主持的三个尺度贯穿的NSF重大项目得到了初步的结果。

通过原子基团的粗粒化使模拟进入了准介观尺度。

通过理论方法与微观参数的结合沟通了微观与介观。

通过理论方法与微观参数表述的本构方程沟通了微观与宏观。

在材料开发领域还有许多困难需要克服。

目前，从事计算机模拟研究的学者几乎遍布国内各个高校与研究所。

队伍不小，需要引导。

在今后5~10年里，我们应当优先发展的研究方向是：更准确描述在水相中分子结构与行为的力场（包括弱氢键）的开发；描述体系内化学反应的分子力场的开发；介观尺度动力学的模拟结果能够跟实验直接对比的方法；介观相互作用与微观相互作用之间的沟通的有效理论；经验的、有效的介观力场方法。

在该努力的过程中，希望本书能够起到抛砖引玉的作用。

在随书所附赠的光盘中，提供了应用分子动力学与耗散粒子动力学程序和理论方法，以及书中介绍科学问题的一些算例。

因著者学识所限，书中难免有不妥之处，恳请读者不吝赐教。

<<软物质的计算机模拟与理论方法>>

内容概要

本书试图深入浅出地介绍近年来计算机模拟方法与理论方法在研究凝聚态物理中软物质行为机理方面的一些应用。

书中一方面介绍了运用基本的微观、介观模拟方法研究软物质体系中的难处理的问题，一方面介绍了增强这些方法能力的实例；一方面阐述了各种模拟方法与理论方法的原理，一方面在随书所附赠的光盘中介绍了各种方法的一些算例和程序。

计算机模拟方法主要集中在微观与介观尺度上的模拟，理论方法主要集中在自洽场理论方法。

本书适用于进入该领域的初学者以及大学生与研究生，对工作在该领域的研究人员也具有很高的参考价值。

<<软物质的计算机模拟与理论方法>>

书籍目录

- 1 高分子链聚合初生态的结晶 1.1 高分子链的“初生态” 1.2 链生长分子动力学方法 1.3 GCMD方法的验证 1.4 聚乙烯单链初生态结构的研究 1.4.1 单链在表面上生长过程的两个阶段 1.4.2 晶干在伸长过程中的协同运动 1.4.3 初生态单分子链的折叠机理 1.5 聚乙烯多链体系初生态结构的研究 1.5.1 不同活性点密度的体系的形貌发展 1.5.2 不同活性点密度的体系的结构分析 1.6 总结 参考文献2 高分子链的穿插与结晶 2.1 非平衡态高分子链的缠结问题和链缠结的结构属性 2.2 高分子链的穿插程度 2.3 表面与本体的穿插程度 2.4 缠结对结晶的影响 2.5 位点序参数 2.5.1 位点序参数方法 2.5.2 临界成核位点序参数值 2.6 穿插程度与结晶的关系 2.6.1 整体穿插程度与结晶速率 2.6.2 局部穿插程度与成核的分布 2.6.3 局部成核与生长过程 2.7 总结 附录一 建模与模拟细节 附录二 ICF与SOP的算法探讨 参考文献3 聚合物的粗粒化模型 3.1 介绍 3.2 普适的粗粒化模型 3.2.1 粒子基粗粒化模型 3.2.2 场基粗粒化模型 3.3 系统的粗粒化模型 3.4 应用实例 3.5 总结与展望 参考文献4 团簇结构优化算法与应用 4.1 引言 4.2 无偏优化算法用于团簇的结构优化 4.2.1 遗传算法 4.2.2 快速退火演化算法 4.2.3 随机隧道算法 4.3 基于格点搜索的团簇优化方法 4.3.1 格点的建立 4.3.2 格点搜索 4.3.3 应用举例 4.4 动态格点搜索算法 4.4.1 动态格点 4.4.2 动态格点搜索算法 4.4.3 动态格点搜索算法的改进 4.4.4 应用举例 参考文献5 杂化蒙特卡罗和广义系综模拟方法6 构象态跃迁行为与玻璃化转变7 表面活性剂与泡沫的稳定性8 分子力学力场及参数化方法9 耗散粒子动力学的原理与应用10 模拟表面活性剂体系的介观力场方法11 自治平均场理论方法 参考文献

章节摘录

然后在蒙特卡罗筛选阶段再加入更复杂的势函数来决定构型取舍，这显然可以显著提高模拟效率。

事实上，读者可以充分发挥自己的想象力来创造出更适合自己的研究对象的算法。

最后要提及杂化蒙特卡罗的一个特点是，它允许显著地增大动力学模拟部分的时间步长，来达到提高模拟效率的目的。

从分子动力学的原理可知，基于数字计算机的离散数值积分不可能精确无误地描述由牛顿第二定律所定义的连续运动轨迹方程。

其主要原因是我们不得不采用有限大小的时间步长。

时间步长越小，由数值积分给出的轨迹就越接近解析方程的描述，但是这必然会加重计算负担。

因此，人们总是希望在保证一定模拟精度的前提下尽可能地使用较大的时间步长。

在HMC方法中，动力学模拟仅仅起到演变构型的作用，我们并不是十分关心它的精度，完全可以在避免体系崩溃的前提下使用尽可能大的时间步长。

然而必须注意的是，时间步长的增大虽然可以加速体系演变，但是在处理包含“陡峭”势函数的体系时必须十分小心，如果由于使用过大的时间步长而导致体系过度地偏离物理许可的构型，会导致蒙特卡罗步骤中被拒构型的比率提高，从而得不偿失。

例如，一个体系中如果包含较强的共价键势函数，一个较大的时间步长将导致共价键的键长严重偏离平衡值，这通常意味着新的构型具有很高的势能，在蒙特卡罗检测阶段，这种高能量的构型有很高的概率被拒绝，从而造成样本浪费。

从上面针对杂化蒙特卡罗方法的介绍和分析中我们可以看到，这个模拟方法既有很大的灵活性，同时也需要使用者根据具体的目标体系进行精细调整。

使用者必须在对传统模拟方法有较深入的理解之后才能真正掌握杂化蒙特卡罗的精髓，为此在上面的介绍性文字中我们为读者提供了大量的相关知识。

可以理解的是，在读者阅读下面关于具体算法描述的文字之前，对HMC方法的实现细节还不十分明了，但是我们相信在读完本节全部内容以后，一定会对这个方法有一个比较全面的认识。

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>