

综述评论

分子动力学模拟的主要技术

文玉华, 朱如曾, 周富信

中科院力学所LNM

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 综述了分子动力学模拟技术的发展, 介绍了分子动力学的基本原理、有关的有限差分技术、势函数的发展、初始条件和边界条件的选取、平衡态系综及其调控、感兴趣量的提取、分子动力学的特别用途以及与其他计算方法的结合. 最后还指出了分子动力学模拟方法本身进一步研究的方向.

关键词 [分子动力学](#) [有限差分法](#) [原子间作用势](#) [平衡态系综](#) [结构分析技术](#)

分类号

”

中科院力学所LNM

Abstract

Key words

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(2360KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [参考文献](#)

服务与反馈

- ▶ [把本文推荐给朋友](#)
- ▶ [加入我的书架](#)
- ▶ [加入引用管理器](#)
- ▶ [复制索引](#)
- ▶ [Email Alert](#)
- ▶ [文章反馈](#)
- ▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

- ▶ [本刊中 包含“分子动力学”的相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)

- [文玉华](#)
- [朱如曾](#)
- [周富信](#)