这一周集中在了对GCMC的概念学习，包含——分子模拟的相关概念（分子力场，分子动力学，结构优化，GCMC，布朗模拟）、GCMC（系综、巨正则系统、mc）、RAPSA（了解了这款软件的输入文件的参数）。

1. 分子模拟
   1. 分子力场

一个分子的能量可以近似看作构成分子的各个原子的空间坐标的函数，简单地讲就是分子的能量随分子构型的变化而变化，而描述这种分子能量和分子结构之间关系的就是分子力场函数。主要学习的是经验力场，通常将力场函数描述为：

**键伸缩能**：构成分子的各个化学键在键轴方向上的伸缩运动所引起的能量变化

**键角弯曲能**：键角变化引起的分子能量变化

**二面角扭曲能**：单键旋转引起分子骨架扭曲所产生的能量变化

**非键相互作用**：包括范德华力、静电相互作用等与能量有关的非键相互作用

**交叉能量项**：上述作用之间耦合引起的能量变化

构成一套力场函数体系需要有一套联系分子能量和构型的函数，还需要给出各个不同原子在不同成键状况下的物理参数，比如正常的键长、键角、二面角等，这些力场参数多来自实验或者量子化学计算。

* 1. 分子动力学
  2. 结构优化

这里将分子动力学和结构优化放在一起，其主要原因在于分子动力学和结构优化的主要不同在于体系中粒子是否存在运动即动能。

* 1. GCMC

1. GCMC
   1. 系综
   2. 巨正则系统