

## MỤC LỤC

PHẦN 1. TỔNG QUAN .....	1
1.1. Cơ sở khoa học và thực tiễn của đề tài .....	1
1.2. Ý nghĩa của đề tài .....	9
1.3. Mục tiêu của đề tài.....	9
1.4. Các nội dung nghiên cứu .....	9
PHẦN 2. TÍNH TOÁN VÀ MÔ PHỎNG .....	11
2.1. Phương pháp động lực học phân tử cổ điển .....	11
2.2. Điều kiện biên tuần hoàn .....	14
2.3. Hàm phân bố xuyên tâm .....	15
2.4. Số phối vị .....	16
2.5. Tiêu chí con đường ngắn nhất Guttman .....	17
2.4. Tính toán .....	19
PHẦN 3. DỰ KIẾN KẾT QUẢ VÀ KẾ HOẠCH NGHIÊN CỨU .....	22
3.1. Kết quả và sản phẩm nghiên cứu.....	22
3.2. Kế hoạch nghiên cứu .....	22
PHẦN 4. ĐỀ XUẤT VÀ KIẾN NGHỊ .....	23
Tài liệu tham khảo .....	23

---