**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